ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG

LÂM VĂN TRÌ

NGHIÊN CỨU SỰ ẢNH HƯỞNG CỦA BỘ TÂM NỘI SUY ĐẾN ĐỘ CHÍNH XÁC CỦA XẤP XỈ ĐẠO HÀM DỰA TRÊN NỘI SUY HÀM CƠ SỞ BÁN KÍNH

LUẬN VĂN THẠC SĨ KHOA HỌC MÁY TÍNH

Thái Nguyên - 2016

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG

LÂM VĂN TRÌ

NGHIÊN CỨU SỰ ẢNH HƯỞNG CỦA BỘ TÂM NỘI SUY ĐẾN ĐỘ CHÍNH XÁC CỦA XẤP XỈ ĐẠO HÀM DỰA TRÊN NỘI SUY HÀM CƠ SỞ BÁN KÍNH

Chuyên ngành : Khoa học máy tính

Mã số : 60 48 01 01

LUẬN VĂN THẠC SĨ KHOA HỌC MÁY TÍNH

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC : **TS. ĐẶNG THỊ OANH**

Thái Nguyên - 2016

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan luận văn này hoàn toàn do tôi thực hiện, dưới sự hướng dẫn của cô giáo TS. Đặng Thị Oanh. Trong luận văn có tham khảo tới các tài liệu trong phần tài liệu tham khảo.

LỜI CẢM ƠN

Để hoàn thành bản luận văn này, bên cạnh sự nỗ lực cố gắng của bản thân còn có sự hướng dẫn nhiệt tình của quý thầy cô, cũng như sự động viên ủng hộ của gia đình và bạn bè trong suốt thời gian học tập nghiên cứu và thực hiện luận văn thạc sĩ.

Em xin gửi lời cảm ơn chân thành đến cô giáo TS. Đặng Thị Oanh, người đã hết lòng giúp đỡ và tạo mọi điều kiện tốt nhất cho em hoàn thành luận văn này.

Em xin chân thành bày tỏ lòng biết ơn đến toàn thể quý thầy cô trong trường Đại học Công nghệ thông tin và Truyền thông cũng như quý thầy cô đã tận tình truyền đạt những kiến thức quý báu và tạo mọi điều kiện thuận lợi cho em trong suốt quá trình học tập, nghiên cứu và cho đến khi thực hiện luận văn.

Em xin chân thành bày tỏ lòng biết ơn đến gia đình, bạn bè và đồng nghiệp, những người đã động viên, hỗ trợ và tạo mọi điều kiện tốt nhất cho em trong suốt thời gian học tập và thực hiện luận văn.

Thái Nguyên, ngày   tháng   năm 2016

Học viên

Lâm Văn Trì

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU, CÁC CHỮ VIẾT TẮT

RBF: Radial Basis Function.

MQ: Multi Quadric.

IMQ: Inverse Multi Quadric.

Gauss: Gaussian.

W33: Wendland'C^6.

rms: Root mean square.

Ω: Miền hình học.

Ξ: Tập các các tâm trong miền và trên biên Ω.

Ξ_{int}: Tập các tâm nằm trong miền Ω.

Ξ_ζ: Bộ tâm gồm ξ và ζ. Ký hiệu: $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, ..., \xi_k\}$.

$\partial\Xi$: Tập các tâm nằm trên biên $\partial\Omega$.

ζ: Tâm thuộc Ξ_{int}.

ξ: Tâm địa phương của ζ và thuộc Ξ.

α: Góc giữa tia $\zeta\xi_i$ và tia $\zeta\xi_{i+1}$.

$\overline{\alpha}$: Góc lớn nhất giữa tia $\zeta\xi_i$ và tia $\zeta\xi_{i+1}$.

$\underline{\alpha}$: Góc nhỏ nhất giữa tia $\zeta\xi_i$ và tia $\zeta\xi_{i+1}$.

μ: Tổng bình phương các góc α_i.

g: Hàm trên biên.

f: Hàm vế phải đạo hàm.

w: véc tơ trọng số.

u: Nghiệm giải tích.

R^n: Không gian n chiều.

λ: Giá trị riêng của ma trận.

ϕ: Hàm cơ sở bán kính.

Φ: Ma trận nội suy.

δ: Tham số hình dạng.

A: Ma trận của hệ phương trình đại số tuyến tính.

b: Véc tơ vế phải của hệ phương trình đại số tuyến tính.

x: Nghiệm của hệ phương trình đại số tuyến tính.

$A+\delta_1 A$: Ma trận nhiễu.

$b+\delta_1 b$: Vế phải nhiễu của hệ phương trình đại số tuyến tính.

$x+\delta_1 x$: Nghiệm nhiễu.

E: Ma trận đơn vị.

X: Bộ tâm phân biệt từng đôi một.

k: Số các tâm ξ_i cần thiết trong tập Ξ_ζ.

m: Số các tâm nằm trong lân cận của ζ với $m>k$.

v: Giới hạn góc đều mà có thể chấp nhận được.

s: Hàm nội suy cơ sở bán kính.

MỤC LỤC

DANH SÁCH BẢNG

LỜI MỞ ĐẦU

Nhiều hiện tượng khoa học và kỹ thuật dẫn đến các bài toán cần phải tính xấp xỉ đạo hàm. Một trong các cách tính xấp xỉ đạo hàm là dựa trên nội suy hàm số. Trong những năm gần đây, nhiều nhà khoa học sử dụng nội suy hàm cơ sở bán kính (RBF-Radial Basis Function) [2] để giải các bài toán liên quan đến đạo hàm.

Để tính xấp xỉ đạo hàm dựa trên nội suy RBF, người ta cần chọn được bộ tâm nội suy. Hiện nay, có một số thuật toán chọn tâm thường được sử dụng, xem [3] và các tài liệu tham khảo của nó. Với mỗi cách chọn tâm đều cho ta chất lượng xấp xỉ đạo hàm riêng biệt. Trong khuôn khổ luận văn này, chúng tôi chỉ xét trong trường hợp 2 chiều. Bởi vì trong trường hợp 1 chiều, nội suy RBF không phát huy tác dụng.

Mục tiêu của luận văn tập trung vào việc chứng tỏ rằng:

- Trong trường hợp các tâm phân bố tương đối đều và hàm có độ dao động ít thì ta có thể chọn k tâm gần nhất với $4 < k < 12$. Trong trường hợp này ta có thể chọn các tâm nằm trên 2 hình vành khuyên gần ζ nhất.

- Trong trường hợp các tâm phân bố phân tán và hàm có độ dao động mạnh mà dùng bộ tâm Ξ_ζ không theo cách chọn của thuật toán chọn tâm trong [3] với số tâm xung quanh ζ là 6 thì có thể cho kết quả không tốt. Chẳng hạn như nếu dùng bộ tâm Ξ_ζ là 6 tâm gần ζ nhất thì có thể cho kết quả không tốt hoặc các điểm nằm trên vành khuyên thứ nhất.

Vì vậy, khi dùng thuật toán chọn tâm, chúng tôi sẽ khảo sát xem chọn giá trị tham số k trong thuật toán là bao nhiêu là đủ.

Nội dung luận văn bao gồm 3 chương: Chương 1, trình bày một số kiến thức cơ sở liên quan đến luận văn; Chương 2, trình bày phương pháp tính xấp xỉ đạo hàm dựa vào hàm RBF; Chương 3, trình bày sự ảnh hưởng của bộ tâm đến độ chính xác của xấp xỉ đạo hàm.

Do thời gian thực hiện luận văn không nhiều, kiến thức còn hạn chế nên khi làm luận văn không tránh khỏi những hạn chế và sai sót. Tác giả mong nhận được sự góp ý và những ý kiến phản biện của quý thầy cô và bạn đọc. Xin chân thành cảm ơn!

Thái Nguyên, ngày tháng năm 2016

Lâm Văn Trì

Chương 1

Kiến thức cơ sở

Trong chương này chúng tôi trình bày các kiến thức cơ sở liên quan đến luận văn, bao gồm: Khái niệm bài toán nội suy; Nội suy dữ liệu phân tán; Nội suy với hàm cơ sở bán kính; Khái niệm hàm xác định dương và ma trận xác định dương; Sự ổn định của ma trận hệ số và cuối cùng là các khái niệm liên quan đến đạo hàm.

1.1. Bài toán nội suy

Một trong các bài toán cơ bản của giải tính số là nội suy hàm số [1]. Bài toán này thường gặp trong các trường hợp sau:

i. Cần phục hồi hàm số $f(x)$ đối với mọi điểm x thuộc khoảng $[a,b]$ nếu chỉ biết giá trị của nó tại một số điểm $x_0, x_1, ..., x_n \in [a,b]$. Những giá trị này thường là các giá trị quan sát, hoặc đo đạc được.

ii. Khi hàm $f(x)$ cho bởi công thức quá phức tạp chẳng hạn

$$f(x) = \int_{cos(x)}^{x^2} \frac{(x+t)^{\frac{3}{2}}}{e^t + sin(xt)} dt$$

và cần tính $f(x) \forall x \in [a,b]$. Khi đó người ta tính gần đúng $f(x)$ tại một số điểm rồi xây dựng công thức nội suy để tính các giá trị khác.

iii. Ngoài ra, nội suy hàm số còn được sử dụng để xây dựng các công thức tính đạo hàm, tính tích phân số hoặc tìm gần đúng nghiệm của phương trình.

Bài toán nội suy hàm một biến số được phát biểu như sau: Trên đoạn $[a,b]$ cho tập các điểm nút $a \le x_0 < x_1 < ... < x_n \le b$ và tại các điểm này cho các giá trị $f(x_i), i = 0,...,n$ của hàm $f(x)$. Cần xây dựng hàm $g(x)$ dễ tính và trùng với hàm $f(x)$ tại các điểm nút trên tức là $g(x_i) = f(x_i), i = 0,...,n$. Một số dạng hàm $g(x)$ thường được dùng để nội suy hàm số là

- Đa thức đại số.
- Hàm hữu tỉ tức là phân thức đại số.
- Đa thức lượng giác.
- Hàm Spline tức là hàm đa thức từng mẩu.

1.2. Nội suy dữ liệu phân tán trong không gian R^d

Cho bộ dữ liệu $(x_i, y_i),\ i = 1,2,...,n,\ x_i \in R^d, y_i \in R$, trong đó x_i là các vị trí đo, y_i là các kết quả tại vị trí đo. Cho $B_1, B_2, ..., B_n$ là các hàm cơ sở của không gian tuyến tính các hàm d biến liên tục [2, 3, 5, 9]. Ký hiệu

$$F = span\{B_1, B_2, ..., B_n\} = \left\{ \sum_{k=1}^{n} C_k B_k,\ C_k \in R \right\}.$$

Bài toán nội suy là tìm hàm $Pf \in F$ sao cho

$$Pf(x_i) = y_i,\ i = 1,2,...,n. \tag{1.2.1}$$

Vì $Pf \in F$ nên

$$Pf(x_i) = \sum_{k=1}^{n} C_k B_k(x),\ x \in R^d, \tag{1.2.2}$$

từ (1.2.1) và (1.2.2) ta có

$$AC = y, \tag{1.2.3}$$

trong đó

$$A = \begin{pmatrix} B_1(x_1) & \dots & B_n(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ B_1(x_n) & \dots & B_n(x_n) \end{pmatrix}. \tag{1.2.4}$$

$$C = (c_1, ..., c_n)^T, \ \ y = (y_1, ..., y_n)^T.$$

Hệ phương trình (1.2.3) và (1.2.4) có nghiệm duy nhất nếu $det(A) \neq 0$, câu hỏi đặt ra là chọn cơ sở $\{B_1, B_2, ..., B_n\}$ như thế nào để điều kiện trên được thỏa mãn? Trong trường hợp này $d = 1$ thì ta có thể chọn cơ sở là

$$\{B_1, B_2, ..., B_n\} = \left\{1, x, x^2, ..., x^{n-1}\right\}.$$

Định lý 1.2.1. *(Mairhuber Curtis) Giả sử rằng $\Omega \subset R^d$, $d \geq 2$, chứa một điểm trong. Khi đó không tồn tại không gian Haar của các hàm liên tục trên Ω [2, 3, 5, 9].*

Trong đó, không gian Haar được định nghĩa như sau:

Định nghĩa 1.2.1. *Cho $\Omega \subset R^d$ và $F \subset C(\Omega)$ là không gian tuyến tính hữu hạn chiều có cơ sở là $\{B_1, B_2, ..., B_n\}$. Ta nói F là không gian Haar trên Ω nếu $det(A) \neq 0$ với mọi bộ tâm phân biệt từng đôi một $x_1, x_2, ..., x_n$ trong Ω, trong đó ma trận A được định nghĩa bởi* (1.2.4) *[9].*

Sự tồn tại của không gian Haar đảm bảo tính khả nghịch của ma trận nội suy, nghĩa là tồn tại duy nhất nghiệm của Bài toán nội suy (1.3.1). Không gian các đa thức một biến bậc $n-1$ chính là không gian Haar n chiều với tập dữ liệu $(x_j;\ y_j), j = 1, ..., n;\ x_j,\ y_j \in R$.

Định lý Mairhuber Curtis cho thấy rằng nếu muốn giải được bài toán nội suy dữ liệu phân tán nhiều biến thì cơ sở cần phụ thuộc vào các vị trí dữ liệu. Để thu được các không gian xấp xỉ phụ thuộc dữ liệu, chúng ta cần xét các hàm xác định dương và ma trận xác định dương.

1.3. Nội suy với hàm cơ sở bán kính

1.3.1. Hàm cơ sở bán kính

Định nghĩa 1.3.1. *Một hàm $\phi : R^d \to R$ được gọi là hàm cơ sở bán kính (RBF) nếu ở đó tồn tại một hàm $\varphi : [0, +\infty) \to R$ sao cho*

$$\phi(x) = \varphi(||x||_2),$$

trong đó $||x||_2$ là chuẩn Euclid [2, 3, 5, 9].

Tên hàm	**Viết tắt**	**Định nghĩa**
Multiquadric	MQ	$\phi_{mq}(r) = \sqrt{1+r^2}$
Inverse multiquadric	IMQ	$\phi_{imq}(r) = 1/\sqrt{1+r^2}$
Gaussian	Gauss	$\phi_g(r) = e^{-r^2}$

Bảng 1.1: Một số hàm cơ sở bán kính dùng trong luận văn, trong đó $r = ||x - x_k||$.

Vì hàm $\varphi(x)$ vẫn là xác định dương khi r được nhân một số lớn hơn không, nên một tham số hình dạng $\delta > 0$ được đưa vào hàm ϕ và ta có Bảng 1.2 tương ứng.

Tên hàm	**Viết tắt**	**Định nghĩa**
Multiquadric	MQ	$\phi_{mq}(r) = \sqrt{\delta^2+r^2}$
Inverse multiquadric	IMQ	$\phi_{imq}(r) = 1/\sqrt{\delta^2+r^2}$
Gaussian	Gauss	$\phi_g(r) = e^{-(r/\delta)^2}$

Bảng 1.2: Một số hàm cơ sở bán kính với tham số hình dạng $\delta > 0$.

1.3.2. Nội suy hàm cơ sở bán kính

Ta ký hiệu

$$\Phi_k(x) = \Phi(x - x_k) = \phi(||x - x_k||) \text{với } k = 1, 2, ..., n,\ x \in R^d. \tag{1.3.1}$$

Khi đó, nội suy hàm số dựa trên các hàm cơ sở bán kính có nghĩa là tìm hàm

$$Pf(x) = \sum_{k=1}^{n} C_k \Phi_k(x) = \sum_{k=1}^{n} C_k \varphi(||x - x_k||)$$

thỏa mãn điều kiện nội suy (1.2.1).

Chú ý 1.3.1.

- Hàm cơ sở phải gắn liền với đối tượng nghiên cứu. Vì vậy, để giải phương trình đạo hàm riêng thì các hàm cơ sở bán kính phải là các hàm khả vi liên tục và thậm chí là khả vi liên tục vô hạn lần.

- Để bài toán nội suy có nghiệm duy nhất, ta cần chọn hàm ϕ phù hợp sao cho $det(A) \neq 0$.

1.4. Hàm xác định dương và ma trận xác định dương

1.4.1. Ma trận xác định dương

Định nghĩa 1.4.1. *Ma trận giá trị thực, đối xứng $A = (A_{jk})$ được gọi là xác định dương nếu dạng toàn phương tương ứng không âm, tức là:*

$$\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} c_j c_k A_{jk} \geq 0, \ \text{với } c = (c_1, c_2, ..., c_n)^T \in R^n.$$

hay tương đương

$$c^T A c \geq 0 \ \text{với } c = (c_1, c_2, ..., c_n)^T \in R^n.$$

Dấu bằng chỉ xảy ra khi và chỉ khi $c = (0, 0, ..., 0)^T$ [2, 3, 5, 9].

Tính chất quan trọng của ma trận xác định dương là các véctơ riêng của nó dương và ma trận xác định dương là không suy biến.

Với cơ sở B_k, nếu Bài toán nội suy 1.3.1 tạo ra ma trận nội suy A xác định dương thì hệ (1.2.3) có nghiệm duy nhất.

1.4.2. Hàm xác định dương

Định nghĩa 1.4.2. *Hàm $\Phi : R^d \to R$ liên tục, được gọi là xác định dương trên R^d nếu và chỉ nếu nó là hàm chẵn và với mọi bộ tâm phân biệt từng đôi một*

$X = \{x_1, x_2, ..., x_n\} \subset R^d$ và mọi véc tơ $C = (c_1, c_2, ..., c_n) \in R^n$ thì dạng toàn phương

$$\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} c_j c_k \Phi(x_j - x_k) \geq 0 \tag{1.4.1}$$

và công thức (1.4.1) *là đẳng thức khi và chỉ khi c là véc tơ 0 [2, 3, 5, 9].*

Định nghĩa 1.4.3. *Hàm một biến $\phi : [0, \infty] \to R$ được gọi là xác định dương trên R^d nếu hàm nhiều biến tương ứng $\Phi(x) = \phi(||x||)$, $x \in R^d$, là xác định dương [2, 3, 5, 9].*

Từ định nghĩa trên và tính chất của ma trận xác định dương ta thấy có thể sử dụng các hàm xác định dương $B_n = \Phi(x - x_k)$ là hàm cơ sở và khi đó ta có:

$$Pf(x) = \sum_{k=1}^{n} c_k \Phi(x - x_k). \tag{1.4.2}$$

Ma trận nội suy $A = [A_{jk}]_{nxn}$, với $A_{jk} = B_k(x_j) = \Phi(x_j - x_k); j, k = 1, ..., n.$

1.4.3. Hàm bán kính xác định dương

Định nghĩa 1.4.4. *Một hàm được gọi là hàm bán kính xác định dương nếu nó vừa là hàm bán kính vừa đồng thời xác định dương [2, 3, 5, 9].*

Giả sử $\Phi(x)$ là hàm xác định dương và được xác định theo công thức (1.3.1). Khi đó ma trận của bài toán nội suy theo hàm $\Phi(x)$ có dạng

$$A = \begin{pmatrix} \Phi(0) & ... & \Phi(x_1 - x_n) \\ ... & ... & ... \\ \Phi(x_n - x_1) & ... & \Phi(0) \end{pmatrix}. \tag{1.4.3}$$

Theo định nghĩa hàm xác định dương thì $det(A) \neq 0$.

1.5. Sai số

1.5.1. Số gần đúng và sai số

Trong thực tế và trong tính toán, thông thường người ta phải làm việc với các giá trị gần đúng của các đại lượng. Các giá trị gần đúng này nhận được bằng các phép đo đạc, bằng thí nghiệm, hoặc do thực hiện các phép tính chia không hết như 1/3, 1/7,..., phép khai căn như $\sqrt{2}$, $\sqrt[3]{5}$, ...

Định nghĩa 1.5.1. *(Định nghĩa 1.1 [1]) Số a được gọi là số gần đúng hay số xấp xỉ của số đúng A (tức giá trị đúng của đại lượng cần quan tâm) và ký hiệu là $a \approx A$, nếu a sai khác A không đáng kể. Nếu $a < A$ thì a được gọi là xấp xỉ thiếu, còn nếu $a > A$ thì a được gọi là xấp xỉ thừa của A.*

Thí dụ: Đối với số $A = \sqrt{2}$ thì $a_1 = 1.41$ là xấp xỉ thiếu, còn $a_2 = 1.42$ là xấp xỉ thừa vì $\sqrt{2} = 1.4142135623...$; đối với số $\pi = 3.1415926535...$ thì 3.14 là xấp xỉ thiếu, còn 3.15 là xấp xỉ thừa.

Định nghĩa 1.5.2. *(Định nghĩa 1.2 [1]) Số $\Delta = |A - a|$ được gọi là sai số tuyệt đối của số gần đúng a .*

Thông thường số đúng A không biết nên ta cũng không biết chính xác sai số tuyệt đối của số gần đúng a , mà chỉ có thể đánh giá nó. Vì thế ta coi đánh giá tốt nhất có thể Δ_a của $\Delta = |A - a|$ là sai số tuyệt đối của a. Như vậy, sai số tuyệt đối của a là số Δ_a bé nhất có thể biết được thỏa mãn điều kiện

$$|A - a| \leq \Delta_a. \tag{1.5.1}$$

Từ bất đẳng thức trên suy ra

$$a - \Delta_a \leq A \leq a + \Delta_a. \tag{1.5.2}$$

Để đơn giản người ta thường viết $A = a \pm \Delta_a$ để ám chỉ rằng Δ_a là sai số tuyệt đối của a.

Thí dụ: Nếu coi $a = 3.14$ là xấp xỉ của π thì sai số tuyệt đối là $\Delta_a \leq 0.002$.
Sai số tuyệt đối không phản ánh đầy đủ mức độ chính xác của phép đo hoặc tính toán. Chẳng hạn, đo chiều dài của hai thanh sắt bằng cùng một thước đo ta nhận được các kết quả sau:

$$l_1 = 115.6\,\text{cm} \pm 0.1\,\text{cm},$$
$$l_1 = 7.5\,\text{cm} \pm 0.1\,\text{cm}.$$

Tuy sai số tuyệt đối của hai phép đo trên là như nhau (= 0.1 cm) nhưng rõ ràng là phép đo thứ nhất chính xác hơn. Để thể hiện điều đó ta đưa vào khái niệm sau.

Định nghĩa 1.5.3. *(Định nghĩa 1.3 [1]) Sai số tương đối của số gần đúng a, ký hiệu bởi δ, là*

$$\delta = \frac{\Delta}{|A|} = \frac{|A - a|}{|A|} \tag{1.5.3}$$

với giả thiết là $A \neq 0$.

Tuy nhiên, do số A và Δ không biết nên trong thực hành ta sẽ chấp nhận sai số tương đối của số gần đúng a là số

$$\delta_a = \frac{\Delta_a}{|a|} \tag{1.5.4}$$

Chú ý rằng sai số tuyệt đối có cùng thứ nguyên với với A, còn sai số tương đối không có thứ nguyên. Người ta thường tính sai số tương đối bằng phần trăm. Vì thế

$$\delta_a = \frac{\Delta_a}{|a|} \times 100\%.$$

Trở lại phép đo chiều dài của các thanh sắt ta thấy rằng sai số tương đối của l_1 là $\delta_1 = \frac{0.1}{115.6} \times 100\% = 0.09\%$, của l_2 là $\delta_2 = \frac{0.1}{7.5} \times 100\% = 1.33\%$. Rõ ràng là δ_1 nhỏ hơn rất nhiều so với δ_2 và phép đo thứ nhất chính xác hơn nhiều so với phép đo thứ hai.

1.5.2. Chữ số có nghĩa và chữ số đáng tin

Một số viết ở dạng thập phân có thể gồm nhiều chữ số. Chẳng hạn số 20.15 có 4 chữ số; số 3.1412 có 5 chữ số.

Định nghĩa 1.5.4. *(Định nghĩa 1.4 [1]) Những chữ số có nghĩa của một số là những chữ số của số đó kể từ chữ số khác không đầu tiên tính từ trái sang phải.*

Thí dụ: Trong các số sau, những chữ số được gạch dưới là những chữ số có nghĩa: $\underline{12.57}$; $\underline{20.15}$; $0.0\underline{3047}$; $0.\underline{304500}$.
Giả sử a là số gần đúng của A và a có biểu diễn

$$\pm\overline{\alpha_m\alpha_{m-`}...\alpha_1\alpha_0,\alpha_{-1}\alpha_{-2}...\alpha_{-n}}$$

tức là

$$\begin{aligned} a &= \pm(\alpha_m.10^m+\alpha_{m-1}.10^{m-1}+...+\alpha_1.10+\alpha_0.10^0+\alpha_{-1}.10^{-1}+...+\alpha_{-n}.10^{-n}+...) \\ &= \pm\sum_s \alpha_s.10^s \end{aligned} \tag{1.5.5}$$

trong đó α_s là những số nguyên từ 0 đến 9.

Định nghĩa 1.5.5. *(Định nghĩa 1.5 [1]) Trong biểu diễn* (1.5.5) *của a chữ số* α_s *được gọi là chữ số đáng tin (hay chữ số đúng) nếu* $\Delta_a \leq \frac{1}{2}.10^s$*, và gọi là chữ số nghi ngờ nếu* $\Delta_a > \frac{1}{2}.10^s$*, trong đó* Δ_a *là sai số tuyệt đối của a.*

Từ định nghĩa trên suy ra rằng nếu α_s là chữ số đáng tin thì mọi chữ số có nghĩa bên trái nó đều là đáng tin, và nếu α_s là đáng ngờ thì mọi chữ số bên phải nó đều là đáng ngờ.
Thí dụ: Số gần đúng $a = 3.7284$ với $\Delta_a = 0.0047$ có 3 chữ số đáng tin là 3, 7 và 2, còn các chữ số 8 và 4 là đáng ngờ.

1.5.3. Cách viết số gần đúng

Có hai cách viết số gần đúng.

a) Cách 1: Viết kèm theo sai số $a \pm \Delta_a$

Cách này thường dùng để viết các kết quả đo đạc, thực nghiệm, trong đó Δ_a là sai số của thiết bị đo.

Thí dụ: 150 cm $\pm$ 0.1 cm; 65 kg $\pm$ 0.1 kg

b) Cách 2: Viết theo quy ước: mọi chữ số có nghĩa đều đáng tin, có nghĩa là sai số tuyệt đối Δ_a không lớn hơn một nửa đơn vị ở hàng cuối cùng.

Thí dụ: Theo cách này ta viết a = 23.54 nếu $\Delta_a \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2} = 0.005$.

1.5.4. Sai số quy tròn

Khi thực hiện các tính toán nếu số a có quá nhiều chữ số trong biểu diễn thập phân, chẳng hạn $a = 3.14151926535$, thì để cho thuận tiện người ta thu gọn số này bằng cách bỏ bớt một số chữ số cuối để được một số a' ngắn gọn hơn và gần đúng nhất với a. Việc làm này được gọi là quy tròn hoặc làm tròn số. Số $\theta_{a'} = |a - a'|$ được gọi là sai số làm tròn.

Dưới đây là quy tắc làm tròn số nhằm bảo đảm cho sai số làm tròn không vượt quá nửa đơn vị của chữ số cuối cùng được giữ lại:

- Nếu bỏ đi nhiều chữ số khác 0 và chữ số bỏ đi đầu tiên ≥ 5 thì thêm vào chữ số giữ lại cuối cùng một đơn vị, còn nếu chữ số bỏ đi đầu tiên < 5 thì để nguyên chữ số giữ lại cuối cùng.

- Nếu chỉ bỏ đi một chữ số 5 thì chữ số được giữ lại cuối cùng nếu là chữ số lẻ thì tăng thêm 1, còn nếu là chẵn thì giữ nguyên.

Thí dụ: Đối với số $a = 3.14151926535$ ta làm tròn thành 3.141519, 3.14152, 3.1415, 3.142, 3.14 nếu cần giữ lại 6, 5, 4, 3 hoặc 2 chữ số sau dấu chấm thập phân. Sai số làm tròn tương ứng không vượt quá $\frac{1}{2} \times 10^{-6}, \frac{1}{2} \times 10^{-5}, \frac{1}{2} \times 10^{-4}, \frac{1}{2} \times 10^{-3}, \frac{1}{2} \times 10^{-2}$.

Số 12.25 ta làm tròn thành 12.2 với sai số là $0.05 = \frac{1}{2} \times 10^{-1}$.

Bây giờ giả sử a là xấp xỉ của A với sai số tuyệt đối là Δ_a. Giả sử ta làm tròn a thành a' với sai số làm tròn là $\theta_{a'}$, tức là $|a' - a| \leq \theta_{a'}$. Khi đó sai số tuyệt đối của số a' là

$$\Delta_{a'} = \left|A - a'\right| = \left|A - a + a - a'\right| \leq |A - a| + \left|a - a'\right| \leq \Delta_a + \theta_{a'}.$$

Như vậy việc quy tròn thường làm tăng sai số tuyệt đối. Điều này dẫn đến kết cục là sau khi làm tròn một số chữ số đáng tin trở nên đáng ngờ.

Thí dụ: Cho a = 0.35 với $\Delta_a = 0.003$. Do đó các chữ số 3 và 5 là đáng tin. Sau khi làm tròn thành $a' = 0.4$ ta có $\Delta_{a'} = \Delta_a + \theta_{a'} = 0.003 + 0.05 = 0.053 > \frac{1}{2} \times 10^{-1}$. Vì thế chữ số 4 trong a' là đáng ngờ. Trong trường hợp này không nên quy tròn số a.

1.5.5. Sự lan truyền sai số

a) Mở đầu

Trên đây ta đã định nghĩa các loại sai số của một số gần đúng. Trong thực tế tính toán các đại lượng gần đúng thường xuất hiện trong một biểu thức phức tạp. Thí dụ thể tích của hình cầu được tính bằng $V = \frac{1}{6}\pi d^3$, trong đó ta chỉ biết xấp xỉ của số π và đường kính d. Vấn đề đặt ra là biết sai số của π và d, liệu ta có thể tính được sai số của V không. Một cách tổng quát, vấn đề đặt ra là sai số của các dữ liệu đầu vào lan truyền và dẫn đến sai số của kết quả tính toán như thế nào?

Để giải quyết vấn đề này xét hàm số u của 2 biến số x và y: $u = f(x, y)$. Giả sử x là xấp xỉ của giá trị đúng X, y là xấp xỉ của giá trị đúng Y và ta coi u là xấp xỉ của giá trị đúng $U = f(X, Y)$. Biết sai số về x và y, hãy tính sai số của u.

Ký hiệu $\Delta x = x - X$ là số gia của x, còn dx là vi phân của biến x. Theo định nghĩa về sai số tuyệt đối, ta có $|\Delta x| \leq \Delta_x$. Theo công thức vi phân của hàm nhiều biến ta có:

$$du = \frac{\partial u}{\partial x}dx + \frac{\partial u}{\partial y}dy.$$

Từ đây

$$du \approx \frac{\partial u}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial u}{\partial y}\Delta y$$

Suy ra

$$\Delta_u = |\frac{\partial u}{\partial x}|\Delta_x + |\frac{\partial u}{\partial y}|\Delta_y \qquad (1.5.6)$$

b) Sai số của tổng

Cho $u = x \pm y$. Ta có $\frac{\partial u}{\partial x} = 1, \frac{\partial u}{\partial x} = \pm 1$. Do đó, từ (1.5.6) suy ra

$$\Delta_u = \Delta_x + \Delta_y. \qquad (1.5.7)$$

Như vậy, sai số tuyệt đối của một tổng đại số bằng tổng các sai số tuyệt đối của các số hạng.

Thí dụ: Giả sử $x = 3.6, y = 6.4$ là hai số đã được làm tròn. Tính tổng của chúng và xác định sai số của tổng thu được.

Thật vậy, vì x và y đã được làm tròn đến một chữ số sau dấu chấm thập phân nên sai số tuyệt đối của chúng là $\Delta_x = \Delta_y = 0.05$. Do đó $u = x + y = 3.6 + 6.4 = 10.0$ với sai số tuyệt đối là $\Delta_u = \Delta_x + \Delta_y = 0.1$, tức là $u = 10 \pm 0.1$.

Chú ý: Xét trường hợp $u = x - y$ và x, y cùng dấu. Lúc đó ta có

$$\delta_u = \frac{\Delta_u}{|u|} = \frac{\Delta_x + \Delta_y}{|x - y|}.$$

Ta thấy rằng nếu $|x - y|$ rất bé thì sai số tương đối rất lớn.

Thí dụ: Giả sử $x = 15.29$ và $y = 15.14$ là hai số đã được làm tròn. Xác định sai số tương đối của x, y và của hiệu hai số trên.

Ta có hiệu $u = x - y = 15.29 - 15.14 = 0.15$. Do x và y đã được làm tròn đến

2 chữ số sau dấu chấm thập phân nên sai số tuyệt đối của chúng là $\Delta_x = \Delta_y = 0.005$. Vì thế sai số tuyệt đối của hiệu là $\Delta_u = \Delta_x + \Delta_y = 0.01$. Do đó sai số tương đối của hiệu là $\delta_u = \frac{\Delta_u}{|u|} = \frac{0.01}{0.15} = 0.066$ trong khi sai số tương đối của x và y tương ứng là $\delta_x = \frac{\Delta_x}{|x|} = \frac{0.005}{15.29} = 0.000327$, $\delta_y = \frac{\Delta_y}{|y|} = \frac{0.005}{15.14} = 0.000330$. Rõ ràng là sai số tương đối của hiệu lớn gấp 200 lần sai số tương đối của từng số x và y. Trong tính toán người ta cố gắng tránh việc trừ hai số gần nhau bằng cách biến đổi biểu thức của hiệu (trong những trường hợp có thể được).

c) Sai số của tích

Giả sử $u = xy$. Ta có $\frac{\partial u}{\partial x} = y, \frac{\partial u}{\partial y} = x$. Từ (1.5.6) suy ra

$$\Delta_x = |y|\Delta_x + |x|\Delta_y.$$

Do đó $\delta_u = \Delta_u/|u| = \Delta_x/|x| + \Delta_y/|y| = \delta_x + \delta_y$. Vậy

$$\delta_u = \delta_x + \delta_y. \tag{1.5.8}$$

Ta có quy tắc: *Sai số tương đối của một tích bằng tổng các sai số tương đối của các thừa số của tích.*

Thí dụ: Giả sử X và Y là hai cạnh của một hình chữ nhật mà độ dài của chúng (tính bằng cm) được làm tròn đến một chữ số sau dấu chấm thập phân là 15.6 và 8.2. Hỏi giá trị thực sự của diện tích của hình chữ nhật nằm trong khoảng nào?

Ký hiệu $x = 15.6, y = 8.2$. Như vậy x là giá trị gần đúng của X và y là giá trị gần đúng của Y với sai số tuyệt đối là 0.05. Do đó sai số tương đối của chúng là $\delta_x = \frac{0.05}{15.6} = 0.0032, \quad \delta_y = \frac{0.05}{8.2} = 0.0061$. Theo (1.5.9) sai số tương đối của tích là $\delta_u = 0.0032 + 0.0061 = 0.0093$. Vì $u = x \times y = 15.6 \times 8.2 = 127.92$ nên sai số tuyệt đối của u là $\Delta_u = |u|\,\delta_u = 127.92 \times 0.0093 = 1.19$. Do đó, $X \times Y = 127.92 \pm 1.19$, tức là giá trị thực sự của diện tích của hình chữ nhật nằm trong khoảng từ 126.73 đến 129.11.

d) Sai số của thương

Cho $u = x/y$. Ta có

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{y}, \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{x}{y^2}.$$

Từ (1.5.6) suy ra

$$\Delta_u = \left|\frac{1}{y}\right| \Delta_x + \left|\frac{x}{y^2}\right| \Delta_y.$$

Do đó

$$\frac{\Delta_u}{|u|} = \Delta_u \left|\frac{y}{x}\right| = \left(\left|\frac{1}{y}\right| \Delta_x + \left|\frac{x}{y^2}\right| \Delta_y\right) \left|\frac{y}{x}\right| = \left|\frac{1}{x}\right| \Delta_x + \left|\frac{1}{y}\right| \Delta_y.$$

Suy ra

$$\delta_{x/y} = \delta_x + \delta_y. \tag{1.5.9}$$

Ta có quy tắc: *Sai số tương đối của một thương bằng tổng các sai số tương đối của số chia và số bị chia.*

e) Sai số của hàm bất kỳ

Cho hàm $u = f(x_1, x_2, ..., x_n)$. Theo công thức vi phân của hàm nhiều biến ta có:

$$du = \frac{\partial u}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u}{\partial x_2} dx_2 + \cdots + \frac{\partial u}{\partial x_n} dx_n.$$

Từ đây ta có

$$\Delta u \approx \frac{\partial u}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u}{\partial x_2} \Delta x_2 + \cdots + \frac{\partial u}{\partial x_n} \Delta x_n$$

Suy ra

$$\Delta_u = \left|\frac{\partial u}{\partial x_1}\right| \Delta_{x_1} + \left|\frac{\partial u}{\partial x_2}\right| \Delta_{x_2} + \cdots + \left|\frac{\partial u}{\partial x_n}\right| \Delta_{x_n}. \tag{1.5.10}$$

Thí dụ. Tính sai số tuyệt đối và sai số tương đối của thể tích hình cầu:

$$V = \frac{1}{6} \pi d^3$$

nếu cho đường kính $d = 3.7 \pm 0.05 cm$ và $\pi = 3.14 \pm 0.0016$.

Thật vậy, xem π và d là đối số của hàm V, áp dụng (1.5.9) và (1.5.10) ta có

$\delta_V = \delta_\pi + 3\delta_d$ (Hệ số 1/6 không ảnh hưởng đến sai số tương đối), $\delta_\pi = \frac{0.0016}{3.14} = 0.0005, \delta_d = \frac{0.05}{3.7} = 0.0135$. Suy ra $\delta_V = 0.0005 + 3 \times 0.0135 = 0.04$. Giá trị gần đúng của thể tích là $V = \frac{1}{6}\pi d^3 = 26.5cm^3$. Do đó, ta tính được sai số tương đối của nó là $\Delta_V = |V| \times \delta_V = 26.5 \times 0.04 = 1.06 \approx 1.1cm^3$. Vì thế $V = 26.5 \pm 1.1cm^3$.

1.5.6. Các loại sai số mắc phải khi giải một bài toán thực tế

Như đã biết, để nghiên cứu một đối tượng thực tế, chẳng hạn một đối tượng vật lý như dòng chảy trong sông, hiện tượng dẫn nhiệt trong một thanh vật chất, hay một đối tượng kinh tế-xã hội,... người ta thường xây dựng mô hình toán học của đối tượng và nghiên cứu đối tượng thông qua mô hình. Do tính chất phức tạp của đối tượng nên người ta không thể đưa hết tất cả các yếu tố liên quan vào mô hình, mà buộc phải loại bỏ những yếu tố không quan trọng và ảnh hưởng ít đến đối tượng. Kết quả là người ta chỉ nhận được mô hình toán học phản ánh gần đúng đối tượng cần nghiên cứu. Sai số mắc phải trong quá trình này gọi là sai số mô hình.

Khi đã có mô hình toán học, thường là các phương trình vi phân, tích phân hoặc phương trình đại số,... người ta phải giải nó. Nói chung người ta không nhận được lời giải đúng của một bài toán mà chỉ có thể nhận được lời giải gần đúng bằng một phương pháp nào đấy, thí dụ phương pháp lặp giải phương trình phi tuyến, phương pháp hình thang tính tích phân,... . Sai số mắc phải khi phải giải một bài toán bằng phương pháp gần đúng được gọi là sai số phương pháp. Đây là loại sai số mà chúng ta cần quan tâm khi nghiên cứu các phương pháp gần đúng (giải tích hoặc số trị) vì sai số này phản ánh chất lượng của phương pháp và thông qua nó có thể đánh giá được khối lượng tính toán cần thiết để có được lời giải với một độ chính xác cho trước.

Sau khi đã có phương pháp hoặc thuật toán giải một bài toán cần phải thực hiện nó trên máy tính để có được lời giải số. Trong quá trình tính toán bằng số này không thể tránh khỏi việc làm tròn số. Sai số xảy ra trong công đoạn này được gọi là sai số tính toán.

Một loại sai số nữa có thể mắc phải khi giải một bài toán thực tế là sai số dữ liệu khi các dữ liệu đầu vào của bài toán nhận được bằng các phép đo đạc hoặc quan sát thực nghiệm hoặc là lời giải gần đúng của một bài toán khác.

1.5.7. Các loại đánh giá sai số phương pháp

Sai số của một phương pháp số có thể được đánh giá tiên nghiệm hoặc hậu nghiệm. Đánh giá sai số tiên nghiệm là đánh giá sai số nhận được trước khi thực hiện tính toán. Thí dụ, để giải một phương trình phi tuyến bằng một phương pháp lặp đơn ta có thể đánh giá được sai số của nghiệm gần đúng nhận được sau n lần lặp theo công thức

$$|x_n - x^*| \leq \frac{q^n}{1-q}\,|x_1 - x_0|\,,$$

trong đó $0 < q < 1, x^*$ là nghiệm đúng, x_0 là xấp xỉ ban đầu.

Đánh giá sai số hậu nghiệm là đánh giá sai số nhận được sau khi tính toán được nghiệm. Thí dụ, sau khi tính được x_n theo phương pháp lặp đơn ta có đánh giá hậu nghiệm

$$|x_n - x^*| \leq \frac{q}{1-q}\,|x_n - x_{n-1}|\,.$$

1.6. Hệ phương trình tuyến tính

Xét một hệ phương trình gồm n phương trình tuyến tính với n ẩn số $x_1, x_2, ..., x_n$ được cho bởi

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ... + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ... + a_{2n}x_n = b_2 \\ ... \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + ... + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{1.6.1}$$

Hệ này có thể viết dưới dạng ma trận $Ax = b$, trong đó

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & ... & a_{1n} \\ ... & ... & ... \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{nn} \end{bmatrix}, x = (x_1, x_2, ...x_n)^T, b = (b_1, b_2, ..., b_n)^T.$$

Nếu $\det A \neq 0$ thì hệ (1.6.1) có nghiệm duy nhất và nghiệm của nó có thể tính theo công thức Cramer:

$$x_j = \frac{\det A_j}{\det A}, \tag{1.6.2}$$

trong đó A_j là ma trận nhận được từ ma trận A bằng cách thay cột thứ j bởi cột b. Công thức (1.6.2) thường chỉ dành cho hệ với ma trận hệ số cỡ nhỏ, còn với ma trận cỡ lớn thì chi phí cho tính toán quá lớn. Do đó, người ta đã đi xây dựng các phương pháp nhanh để giải hệ phương trình đại số tuyến tính cỡ lớn là khai thác triệt để các thông tin về ma trận của hệ.

Dưới đây là một số dạng đặc biệt của ma trận:

- Ma trận đường chéo: Ma trận vuông cấp n mà mọi phần tử nằm ngoài đường chéo chính bằng 0, tức là $a_{ij} = a_{ji} = 0$, với $i \neq j$, được gọi là ma trận đường chéo.

- Nếu ma trận đường chéo có $a_{ii} = 1$ thì ta gọi là ma trận đơn vị cấp n và ta thường kí hiệu là E hoặc I.

- Ma trận tam giác trên: Ma trận vuông A được gọi là ma trận tam giác trên, nếu A có dạng

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ . & . & \dots & . \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{bmatrix},$$

tức là $a_{ij} = 0$ khi $i > j$.

- Ma trận tam giác dưới: Tương tự ma trận vuông A được gọi là ma trận tam giác dưới, nếu A có dạng

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & 0 \\ . & . & \dots & . \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

tức là $a_{ij} = 0$ khi $i < j$.

- Ma trận thưa: Ma trận thưa là ma trận có rất nhiều phần tử bằng 0.

- Ma trận đối xứng: Ma trận A được gọi là ma trận đối xứng nếu $A = A^T$, tức là $a_{ij} = a_{ji}, i = 1, 2, ..., n, j = 1, 2, ..., n$,

1.7. Một số phương pháp giải hệ phương trình tuyến tính

1.7.1. Phương pháp Gaussian

Ý tưởng của phương pháp khử Gauss là khử dần các ẩn để đưa hệ ban đầu về hệ với ma trận tam giác trên bằng các phép biến đổi tương đương như:

- Đổi chỗ 2 phương trình bất kỳ.

- Nhân một phương trình bất kỳ với một số khác không.
- Cộng vào một phương trình một tổ hợp tuyến tính của một số phương trình khác

Như vậy phương pháp Gauss gồm 2 quá trình:

- Quá trình thuận: đưa hệ về dạng tam giác trên,
- Quá trình ngược: giải hệ tam giác trên từ dưới lên trên.

a) Quá trình thuận: Để viết cho gọn ta xét hệ

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ... + a_{1n}x_n = a_{1,n+1} \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ... + a_{2n}x_n = a_{2,n+1} \\ \qquad\qquad ... \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + ... + a_{nn}x_n = a_{n,n+1} \end{cases} \tag{1.7.1}$$

và đặt $a_{\mathrm{ij}}^{(0)} = a_{\mathrm{ij}}, (i = 1, 2, ..., n; j = 1, ..., n+1)$.

Bước 1: Dùng phương trình đầu tiên để khử x_1 trong $n-1$ phương trình còn lại: Giả sử $a_{11} \neq 0$ (ta luôn có được điều này bằng cách đổi chỗ hai phương trình). Chia hai vế của phương trình thứ nhất cho a_{11} ta được phương trình

$$x_1 + b_{12}x_2 + ... + b_{1n}x_n = b_{1,n+1}, \tag{1.7.2}$$

với $b_{1j} = \frac{a_{1j}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}, j = 2, ..., n+1$.

Cộng vào phương trình thứ i của hệ (1.7.1) phương trình (1.7.2) sau khi đã nhân với $-a_{i1}^{(0)}, i = 2, ..., n$ ta được hệ

$$\begin{cases} a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + ... + a_{2n}^{(1)}x_n = a_{2,n+1}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_2 + ... + a_{3n}^{(1)}x_n = a_{3,n+1}^{(1)} \\ \qquad\qquad ... \\ a_{n2}^{(1)}x_2 + a_{n2}^{(1)}x_2 + ... + a_{nn}^{(1)}x_n = a_{n,n+1}^{(1)} \end{cases} \tag{1.7.3}$$

với $a_{\mathrm{ij}}^{(1)} = a_{\mathrm{ij}}^{(0)} - a_{\mathrm{i}1}^{(1)} b_{1j}, i = 2, ..., n; j = 2, ..., n+1.$

Như vậy sau bước 1 ta thu được phương trình (1.7.2) và hệ (1.7.3).

Bước 2: Dùng phương trình đầu tiên trong (1.7.3) khử x_2 trong các phương trình còn lại tương tự như đã làm trong bước 1. Quá trình được tiếp tục như vậy. Kết quả sau bước thứ m ta thu được hệ

$$\begin{array}{l} x_m + b_{m,m+1}x_{m+1} + ... + b_{m,n}x_n = b_{m,n+1} \\ a_{m+1,m+1}^{(m)}x_{m+1} + ... + a_{m+1,n}^{(m)}x_n = a_{m+1,n+1}^{(m)} \\ a_{n,m+1}^{(m)}x_{m+1} + ... + a_{m,n}^{(m)}x_n = a_{n,n+1}^{(m)} \end{array},$$

với

$$b_{mj} = a_{mj}^{(m-1)}/a_{mm}^{(m-1)}, j = m+1, ..., n+1,$$

$$a_{\mathrm{ij}}^{(m)} = a_{\mathrm{ij}}^{(m-1)} - a_{\mathrm{im}}^{(m-1)} b_{mj}, i = m+1, ..., n; j = m+1, ..., n+1.$$

Cuối cùng, sau n bước khử ta thu được hệ phương trình với ma trận tam giác trên sau đây

$$\begin{array}{l} x_1 + b_{12}x_2 + ... + b_{1n}x_n = b_{1,n=1} \\ x_2 + ... + b_{2n}x_n = b_{2,n+1} \\ .... \\ x_n = b_{n,n+1} \end{array} \qquad (1.7.4)$$

Các hệ số được tính theo công thức

$$\begin{array}{l} b_{mj} = a_{mj}^{(m-1)}/a_{mm}^{(m-1)} \quad (m = 1, ..., n; j = m+1, ..., n+1) \\ a_{ij}^{(m)} = a_{ij}^{(m-1)} - a_{im}^{(m-1)} b_{mj} \quad (i = m+1, ..., n;\ j = m+1, ..., n+1) \end{array} \qquad (1.7.5)$$

Các phần tử $a_{mm}^{(m-1)}$ $(m = 1, ..., n)$ được gọi là các phần tử trụ hay các phần tử chủ đạo.

b) Quá trình ngược: Giải hệ (1.7.4) từ dưới lên trên

$$\begin{aligned} x_n &= b_{n,n+1} \\ x_k &= b_{k,n+1} - \sum_{j=k+1}^{n} b_{k,j} x_j \quad (k = n-1, ..., 1). \end{aligned} \qquad (1.7.6)$$

Khối lượng tính toán: Dễ thấy rằng số phép toán nhân, chia và trừ để thực hiện quá trình thuận (1.7.5) là

$$\sum_{m=1}^{n} [(n-m+1) + 2(n-m-1)(n-m)] = \sum_{k=1}^{n} [k + 2k(k-1)] = \sum_{k=1}^{n} (2k^2 - k)$$
$$= \frac{n\,(n+1)\,(4n-1)}{6}$$

Số phép toán để thực hiện quá trình ngược là $n(n-1)$. Do đó, tổng số phép toán của phương pháp Gauss là $(4n^3 + 9n^2 - 7n)/6$ hay cỡ $2n^3/3$ khi n đủ lớn.

Thí dụ: Ta minh hoạ phương pháp Gauss giải hệ phương trình sau

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 3x_3 = 4 \\ 3x_1 + x_2 - 2x_3 = -2 \\ 4x_1 + 11x_2 + 7x_3 = 7. \end{cases}$$

Các hệ số và vế phải của các hệ trung gian thu được sau từng bước khử được viết trong dạng ma trận mở rộng như sau

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & -2 & -2 \\ 4 & 11 & 7 & 7 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1.5 & 2 \\ 0 & -5 & -6.5 & -8 \\ 0 & 3 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$
$$\to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1.5 & 2 \\ 0 & 1 & 1.3 & 1.6 \\ 0 & 0 & -2.9 & -5.8 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1.5 & 2 \\ 0 & 1 & 1.3 & 1.6 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Quá trình tính ngược cho ta $x_1 = 1, x_2 = -1, x_3 = 2$.

1.7.2. Phương pháp lặp Jacobi

Ta viết hệ phương trình $Ax = b$ trong dạng chi tiết:

$$a_{ii}x_i + \sum_{j\neq i} a_{ij}x_j = b_i, \quad i = 1,2,...,n \tag{1.7.7}$$

Khi đó xuất phát từ một xấp xỉ $x^{(0)}$ bất kỳ có thể tính các thành phần của các xấp xỉ tiếp theo của hệ từ phương trình:

$$a_{ii}x_i^{(k+1)} + \sum_{j\neq i} a_{\text{ij}}x_j^{(k)} = b_i, \quad i = 1,2,...,n, \quad k = 0,1,2,... \tag{1.7.8}$$

Giả sử $\forall i, a_{ii} \neq 0$. Khi đó từ (1.7.8) ta được:

$$x_i^{(k+1)} = -\sum_{j\neq i} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}}, \quad i = 1,2,...,n, \quad k = 0,1,2,... \tag{1.7.9}$$

Cách tính các xấp xỉ liên tiếp của hệ theo công thức trên chính là phương pháp lặp Jacobi.

Định lý 1.7.1. *Nếu tồn tại một số $0 < q < 1$ sao cho:*

$$\forall i = 1,2,...,n, \quad \sum_{\substack{j\neq i \\ j=1}}^{n} \left|a_{ij}\right| \leq q\left|a_{ii}\right| \tag{1.7.10}$$

thì phương pháp lặp Jacobi giải hệ phương trình $Ax = b$ hội tụ với bất kỳ xấp xỉ ban đầu $x^{(0)}$ và đối với sai số ta có các đánh giá:

$$\left\|x^{(k)} - x\right\|_\infty \leq \frac{q^k}{1-q}\left\|x^{(0)} - x^{(1)}\right\|_\infty, \quad k = 0,1,2,... \tag{1.7.11}$$

$$\left\|x^{(k)} - x\right\|_\infty \leq \frac{q}{1-q}\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_\infty, \quad k = 0,1,2,... \tag{1.7.12}$$

trong đó x là nghiệm đúng của hệ [5].

Nhận xét 1: Có trường hợp không thể áp dụng phương pháp Jacobi ngay cho hệ phương trình đã cho, mà phải thực hiện việc đổi chỗ các phương trình để được hệ với ma trận chéo trội. Thí dụ,ta đổi chỗ hàng 1 và hàng 2 cuả ma trận:

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 5 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & 6 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 5 & 1 & -1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 6 \end{bmatrix}$$

Nhận xét 2: Nếu trong không gian R^n ta sử dụng chuẩn $||.||_1$ của vectơ được xác định bởi $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$ thì:

$$\|S\|_1 = \max_{1\le j\le n} \sum_{i=1}^{n} \left|S_{ij}\right| = \max_{1\le j\le n} \frac{\sum_{i\neq j} \left|a_{ij}\right|}{\left|a_{ij}\right|}$$

Do đó ta cũng có kết quả tương tự Định lý (1.7.1), trong đó thay cho điều kiện (1.7.10) là điều kiện tồn tại $0 < q_1 < 1$ sao cho:

$$\forall j = 1,...,n, \quad \sum_{\substack{j\neq i \\ i=j}}^{n} \left|a_{ij}\right| \le q_1 \left|a_{ii}\right| \qquad (1.7.13)$$

và trong các đánh giá (1.7.11), (1.7.12) thay cho chuẩn $\|.\|_\infty$ là chuẩn $\|.\|_1$.

1.8. Sự ổn định của ma trận hệ số

Trong nhiều trường hợp người ta thu được hệ phương trình đại số tuyến tính

$$Ax = b, \qquad (1.8.1)$$

trong đó các hệ số a_{ij} và b_i được tính theo công thức nào đó, có thể là khá phức tạp cho nên không tránh khỏi sai số. Khi đó người ta thu được không phải là hệ (1.8.1), mà là hệ phương trình với ma trận nhiễu $A + \delta_1 A$ và vế phải nhiễu $b + \delta_1 b$ [1], và tất nhiên nghiệm của hệ nhiễu này bây giờ không phải là x mà là $x + \delta_1 x$ [1]. Như vậy, ta có

$$(A + \delta_1 A)(x + \delta_1 x) = b + \delta_1 b. \qquad (1.8.2)$$

Vấn đề đặt ra là liệu sự thay đổi $\delta_1 x$ của nghiệm có phụ thuộc liên tục vào sự thay đổi của dữ kiện đầu vào là $\delta_1 A$ và $\delta_1 b$ hay không, tức là khi dữ kiện đầu vào thay đổi ít thì liệu nghiệm có thay đổi ít không? Dưới đây ta chỉ ra một vài ví dụ, trong đó xảy ra hiện tượng "sai một ly đi một dặm", cụ thể là sai số nhỏ của dữ kiện dẫn đến sai số lớn của nghiệm.

Thí dụ 1. Hệ phương trình

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 = 1 \\ x_1 + 2.01x_2 = 1 \end{cases} \tag{1.8.3}$$

có nghiệm là $x_1 = 1, x_2 = 0$. Hệ với mẫu nhỏ của vế phải

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 = 1 \\ x_1 + 2.01x_2 = 1.01 \end{cases}$$

lại có nghiệm là $x_1 = -19, x_2 = 10$, rất khác so với nghiệm của hệ (1.8.3).

Thí dụ 2. Hệ phương trình

$$\begin{cases} 1.0001x_1 + x_2 = 3 \\ x_1 + x_2 = 3 \end{cases} \tag{1.8.4}$$

có nghiệm là $x_1 = 0, x_2 = 3$. Trong khi đó hệ với nhiễu nhỏ của ma trận A

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 3 \\ x_1 + 1.0001x_2 = 3 \end{cases}$$

có nghiệm là $x_1 = 3, x_2 = 0$, rất khác so với nghiệm của hệ (1.8.4).

Thí dụ 3. Hệ phương trình

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 = 2 \\ 2.x_1 + 1.01x_2 = 2.01 \end{cases} \tag{1.8.5}$$

có nghiệm là $x_1 = 0.5, x_2 = 1$. Nhưng hệ phương trình trên với sự thay đổi ít của ma trận A và vế phải

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 = 2 \\ 2.01x_1 + x_2 = 2.05 \end{cases} \tag{1.8.6}$$

lại có nghiệm là $x_1 = 5, x_2 = -8$, khác xa với nghiệm của hệ gốc (1.8.6).

Trong những thí dụ trên ta nói rằng hệ phương trình có *nghiệm không ổn định*.

Ta sẽ đi tìm nguyên nhân của sự không ổn định này bằng cách đánh giá sai số của nghiệm qua sai số của ma trận A và vế phải b. Ở đây ta giả thiết rằng $det(A) \neq 0$, do đó hệ có nghiệm duy nhất.

1) Trước hết xét trường hợp $\delta_1 A = 0, \delta_1 b \neq 0$. Khi đó ta có

$$A(x + \delta_1 x) = b + \delta_1 b.$$

Ta được $A\delta_1 x = \delta_1 b$. Do đó $\delta_1 x = A^{-1}\delta_1 b$, và ta có

$$||\delta_1 x|| \leq ||A^{-1}||||\delta_1 b||. \tag{1.8.7}$$

Đánh giá trên không thể làm tốt hơn được vì dấu bằng có thể xảy ra. Thật vậy, trong trường hợp khi A là ma trận đối xứng xác định dương, giả sử $e_1, e_2, ..., e_n$ là cơ sở trực chuẩn cấu thành từ các véc tơ riêng của A ứng với các giá trị riêng $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_n$ ta có $||A^{-1}|| = 1/\lambda_1$. Đặt $\delta_1 b = e_1$, ta có $\delta_1 x = e_1/\lambda_1$. Do vậy $||\delta_1 b|| = 1, ||\delta_1 x|| = 1/\lambda_1$ và ta được dấu bằng trong (1.8.7).

Từ đánh giá trên suy ra rằng nếu $||A^{-1}||$ lớn (điều này xảy ra khi A gần suy biến) thì sự thay đổi nhỏ của vế phải có thể dẫn đến sự thay đổi lớn của nghiệm của hệ phương trình.

Bây giờ ta đánh giá sai số tương đối của nghiệm qua sai số tương đối của vế phải.

Từ phương trình $Ax = b$ ta có đánh giá $||b|| \leq ||A||||x||$. Kết hợp với đánh giá (1.8.7) ta thu được

$$\frac{||\delta_1 x||}{||x||} \leq ||A||||A^{-1}||\frac{||\delta_1 b||}{||b||}. \tag{1.8.8}$$

Ký hiệu

$$cond(A) = ||A||||A^{-1}||$$

và gọi nó là số điều kiện của ma trận A. Do $E = AA^{-1}$ nên $1 = ||E|| \leq ||A||||A^{-1}||$. Nếu $cond(A) >> 1$ ta nói rằng A là *ma trận với điều kiện xấu.*

Chú ý rằng số điều kiện của ma trận phụ thuộc vào các xác định chuẩn. Nếu ta dùng chuẩn $||.||_2$ thì dễ thấy rằng khi A là ma trận đối xứng $cond(A) = \frac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|}$, trong đó λ_{max} và λ_{min} là các giá trị riêng với modul lớn nhất và nhỏ nhất tương ứng.

Tương tự như đối với đánh giá (1.8.7), cũng có thể chứng tỏ rằng đánh giá (1.8.8) là không thể làm tốt hơn.

2) Trong trường hợp $\delta_1 b = 0, \delta_1 A \neq 0$ có thể chứng minh đánh giá sau

$$\frac{||\delta_1 x||}{||x + \delta_1 x||} \leq ||A||||A^{-1}||\frac{||\delta_1 A||}{||A||} \tag{1.8.9}$$

và đánh giá này không thể làm tốt hơn.

Các ma trận trong các Thí dụ 1 - 3 đều là các ma trận với điều kiện xấu. Số điều kiện tương ứng của chúng tương ứng là 1004, 40002 và 501 là những số khá lớn. Đó chính là nguyên nhân gây ra sự không ổn định của nghiệm của hệ phương trình.

1.9. Một số khái niệm về đạo hàm, vi phân của hàm số nhiều biến

1.9.1. Đạo hàm riêng

Định nghĩa 1.9.1. *Cho hàm số $u : D \subset R^2 \rightarrow R$ xác định bởi $(x,y) \mapsto u(x,y)$. Điểm $M_0(x_0,y_0) \in D$. Nếu cho $y = y_0$, hàm số một biến số $x \mapsto u(x,y_0)$ có đạo* *hàm tại $x = x_0$, thì đạo hàm đó được gọi là đạo hàm riêng của u đối với x tại M_0 và được ký hiệu là*

$$u_x^{'}(x_0, y_0) \text{ hay } \frac{\partial u}{\partial x}(x_0, y_0).$$

Biểu thức

$$\Delta_x u = u(x_0 + \Delta x, y_0) - u(x_0, y_0)$$

được gọi là số gia riêng của $u(x, y)$ theo x tại (x_0, y_0). Ta có

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_0, y_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta_x u}{\Delta x}$$

Tương tự như vậy, ta có định nghĩa đạo hàm riêng của u đối với y tại M_0, ký hiệu là

$$u_y^{'}(x_0, y_0) \text{ hay } \frac{\partial u}{\partial y}(x_0, y_0).$$

Các đạo hàm riêng của hàm số n biến số $(n \geq 3)$ được định nghĩa tương tự. Khi tính đạo hàm riêng của một hàm số theo biến số nào, chỉ việc xem như hàm số chỉ phụ thuộc biến số ấy, các biến số khác được coi như không đổi, rồi áp dụng quy tắc tính đạo hàm của hàm số một biến số [8, 6].

1.9.2. Vi phân toàn phần

Cho hàm số $u : D \subset R^2 \to R$ xác định bởi $(x, y) \mapsto u(x, y)$. Lấy các điểm $M_0(x_0, y_0) \in D, M(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) \in D$. Biểu thức

$$\Delta u = u(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) - u(x_0, y_0)$$

được gọi là số gia toàn phần của u tại M_0. Nếu có thể biểu diễn dưới dạng

$$\Delta u = A\Delta x + B\Delta y + \alpha\Delta x + \beta\Delta y,$$

trong đó A, B là những số chỉ phụ thuộc x_0, y_0, còn α, β dần tới 0 khi $M \to M_0$, tức là $\Delta x \to 0, \Delta y \to 0$, thì ta nói rằng hàm số u là khả vi tại M_0, biểu thức

$A\Delta x + B\Delta y$ được gọi là *vi phân toàn phần* của $u(x,y)$ tại M_0 và được ký hiệu là du. Hàm số $u(x,y)$ được gọi là khải vi trong miền D nếu nó khả vi tại mọi điểm $M \in D$ [8, 6].

Định lý 1.9.1. *[8] Nếu hàm số $u(x,y)$ có các đạo hàm riêng ở lân cận của điểm $M_0(x_0,y_0)$ và các đạo hàm riêng ấy liên tục tại $M_0(x_0,y_0)$ thì $u(x,y)$ khả vi tại $M_0(x_0,y_0)$ và ta có*

$$du = u_x^{'}\Delta x + u_y^{'}\Delta y.$$

Tương tự như đối với hàm số một biến số, nếu x,y là biến số độc lập thì $dx = \Delta x, dy = \Delta y$, do đó

$$du = u_x^{'}dx + u_y^{'}dy.$$

1.9.3. Đạo hàm và vi phân cấp cao

Cho hàm số $u(x,y)$. Các đạo hàm riêng $u_x^{'}, u_y^{'}$ là những đạo hàm riêng cấp một. Các đạo hàm riêng của các đạo hàm riêng cấp một nếu tồn tại được gọi là những đạo hàm riêng cấp hai. Ta có bốn đạo hàm riếng cấp hai và ký hiệu như sau:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = u_{xx}^{''}(x,y),$$
$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = u_{xy}^{''}(x,y),$$
$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} = u_{yx}^{''}(x,y),$$
$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = u_{yy}^{''}(x,y).$$

Định lý 1.9.2. *(Schwarz [8]). Nếu trong một lân cận của điểm $M_0(x_0,y_0)$ hàm số $u(x,y)$ có các đạo hàm riêng cấp hai $u_{xy}^{''}, u_{yx}^{''}$ và các đạo hàm ấy liên tục tại $M_0(x_0,y_0)$ thì $u_{xy}^{''} = u_{yx}^{''}$ tại $M_0(x_0,y_0)$.*

Xét hàm số $u(x,y)$. Vi phần toàn phần của nó

$$du = u_x^{'}\Delta x + u_y^{'}\Delta y,$$

nếu tồn tại, cũng là một hàm số hai biến số. Vi phần toàn phần của dz nếu tồn tại, được gọi là vi phân toàn phần cấp hai của z và được ký hiệu là d^2z. Vậy

$$\begin{aligned}d^2z &= d\,(dz) = d\left(u'_x dx + u'_y dy\right) = \left(u'_x dx + u'_y dy\right)'_x dx + \left(u'_x dx + u'_y dy\right)'_y dy\\ &= u''_{xx}dx^2 + \left(u''_{xy} + u''_{yx}\right)dxdy + u''_{yy}dy^2.\end{aligned}$$

Giả thiết rằng u''_{xy} và u''_{yx} liên tục, khi đó chúng bằng nhau, vì vậy

$$d^2z = u''_{xx}dx^2 + 2u''_{xy}dxdy + u''_{yy}dy^2.$$

Cứ tiếp tục như vậy ta định nghĩa các vi phân cấp cao hơn

$$d^n u = d(d^{n-1}u).$$

Chương 2

Phương pháp chọn tâm cho tính xấp xỉ đạo hàm bởi nội suy RBF

Trong chương này chúng tôi tập trung vào cách tính véc tơ trọng số nhờ nội suy hàm RBF; Một số cách chọn bộ tâm cho nội suy hàm cơ sở bán kính;Vấn đề chọn tham số hình dạng đảo bảo sự ổn định của ma trận nội suy; Tính xấp xỉ đạo hàm nhờ véc tơ trọng số.

2.1. Véc tơ trọng số từ nội suy hàm cơ sở bán kính

Trong phần này chúng tôi trình bày một số kết quả của [3].
Cho bộ tâm phân biệt từng đôi một $X = \{x_1, x_2, ..., x_n\} \subset R^d$, $u : R^d \to R$ là hàm liên tục và đủ trơn. Giả sử $\phi : R_+ \to R$ là hàm xác định dương và đủ trơn [2]. Khi đó hàm nội suy RBF $s(x)$ của hàm $u(x)$ được xác định bởi công thức

$$s(x) = \sum_{j=1}^{n} a_j \Phi(x - x_j),\ \Phi(x) := \phi(||x||), \tag{2.1.1}$$

sao cho

$$s(x_i) = u(x_i),\ i = 1, 2, ..., n. \tag{2.1.2}$$

Các hằng số a_i được chọn để điều kiện nội suy (2.1.2) được thoả mãn. Từ (2.1.1) – (2.1.2) ta có

$$\sum_{j=1}^{n} a_j \Phi(x_i - x_j) = u(x_i),\ \ i = 1, 2, ..., n. \tag{2.1.3}$$

Ký hiệu

$$\Phi|_X = [\Phi(x_i - x_j)]_{i,j=1}^{n,n}, \quad u|_X = [u(x_1), u(x_2), ..., u(x_n)]^T, \quad a = [a_1, a_2, ..., a_n]^T,$$

khi đó ta có thể viết (2.1.3) dưới dạng ma trận

$$\Phi|_X a = u|_X.$$

Vì ϕ là hàm xác định dương nên ma trận $\Phi|_X$ là xác định dương với bộ tâm X phân biệt từng đôi một. Do đó, véc tơ a được xác định duy nhất

$$a = [\Phi|_X]^{-1} u|_X. \tag{2.1.4}$$

Thay vì tính đạo hàm của hàm $u(x)$, ta tính đạo hàm của hàm $s(x)$. Để làm được việc này, ta sẽ áp toán tử đạo hàm D lên hàm $s(x)$ được biểu diễn bởi công thức 2.1.1và ta có

$$\begin{aligned} Ds(x) &= \sum_{j=1}^{n} a_j D\Phi(x - x_j) \\ &= a^T D\Phi(x - .)|_X \\ &= u|_X^T [\Phi|_X]^{-1} D\Phi(x - .)|_X, \end{aligned} \tag{2.1.5}$$

trong đó

$$D\Phi(x - .)|_X = (D\Phi(x - x_1), ..., D\Phi(x - x_n))^T.$$

Ký hiệu $w = [w_1, w_2, ..., w_n]^T$ và đặt

$$w = [\Phi|_X]^{-1} D\Phi(x - .)|_X. \tag{2.1.6}$$

Từ (2.1.5) – (2.1.6) ta có thể viết

$$Ds(x) = \sum_{i=1}^{n} w_i(x) u(x_i). \tag{2.1.7}$$

Ta nhận được công thức đạo hàm số (2.1.7) với véc tơ trọng số $w = [w_1, w_2, ..., w_n]^T$ được xác định bởi (2.1.6). Quan sát công thức (2.1.6) ta có thể thấy véc tơ trọng số w là nghiệm của phương trình

$$\sum_{j=1}^{n} w_j \Phi(x_i - x_j) = D\Phi(x - x_i), i = 1, 2, ..., n. \tag{2.1.8}$$

Điều này có nghĩa là véc tơ trọng số w được cho bởi các hệ số của nội suy hàm cơ sở bán kính với dữ liệu cho bởi hàm $D\Phi(x - .)|_X$. Vì $\Phi(x_i - x_j) = \Phi((x - x_i) - (x - x_j))$ nên nếu ta nội suy hàm $D\Phi$ tại các tâm $x - x_j,\ j = 1, 2, ..., n$, thì ta thu được các hệ số nội suy như trong công thức (2.1.6) và đó chính và véc tơ trọng số. Vì vậy chúng ta có phương pháp tính véc tơ trọng số như sau :

Mệnh đề 2.1.1. *Cho bộ tâm phân biệt từng đôi một $X = \{x_1, x_2, ..., x_n\} \in R^d$, $u : R_+ \to R$ là hàm liên tục và đủ trơn, D là toán tử đạo hàm và hàm nội suy cơ sở bán kính $s(x)$ của hàm $u(x)$ được biểu diễn dưới dạng* (2.1.1) – (2.1.2). *Khi đó véc tơ trọng số w của đạo hàm tại x được tìm bằng cách giải hệ phương trình* (2.1.8)*, hay véc tơ trọng số là các hệ số của nội suy hàm cơ sở bán kính với dữ liệu được cho bởi hàm $D\Phi(x - .)|_X$.*

Giả sử cho bộ tâm $\Xi \subset \Omega$, để tính được đạo hàm tại điểm $\zeta \in \Xi$ tại theo công thức (2.1.7), ta chọn bộ cho nội suy hàm RBF, từ bây giờ ta sẽ ký hiệu bộ tâm này là Ξ_ζ và gọi là bộ tâm hỗ trợ tính véc tơ trọng số hay hỗ trợ tính đạo hàm, Ξ_ζ bao gồm ζ và một số điểm nằm trong vị trí lân cận với nó. Mục tiếp theo chúng tôi trình bày một số tiêu chuẩn chọn bộ tâm hỗ trợ tính xấp xỉ đạo hàm.

2.2. Một số cách chọn bộ tâm nội suy

Trong Mục này chúng tôi trình các tiêu chuẩn chọn bộ tâm hỗ trợ tính đạo hàm như sau: Tiêu chuẩn láng giềng gần nhất, tiêu chuẩn n điểm tự nhiên, tiêu chuẩn 4 góc phần tư và tiêu chuẩn góc đều (Xem [7] và các tài liệu tham khảo của nó).

2.2.1. Tiêu chuẩn láng giềng gần nhất

Ξ_ζ bao gồm ζ và n điểm thuộc $\Xi \setminus \{\zeta\}$ và gần ζ nhất.

2.2.2. Tiêu chuẩn n điểm tự nhiên

Ξ_ζ bao gồm ζ và các điểm thuộc $\Xi \setminus \{\zeta\}$ nằm trên 1 hặc 2 vành khuyên với ζ là tâm.

2.2.3. Tiêu chuẩn 4 góc phần tư

Ξ_ζ bao gồm ζ và 8 điểm thuộc $\Xi \setminus \{\zeta\}$, trong đó mỗi cung phần tư chứa 2 điểm gần ζ nhất.

2.2.4. Tiêu chuẩn góc đều

Giả sử cho bộ tâm $\Xi \subset \overline{\Omega}$, $\Xi_\int$ là các điểm nằm trong miền Ω, $\partial\Xi := \Xi \setminus \Xi_{int}$ là các điểm nằm trên biên.

Với mỗi $\zeta \in \Xi_{int}$, ta chọn tập $\Xi_\zeta \subset \Xi$. Đặt $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, ..., \xi_k\}$, trong đó các điểm $\xi_1, ..., \xi_k$ được sắp xếp theo chiều ngược kim đồng hồ đối với ζ [2]. Xét hàm chi phí

$$\mu(\xi_1, \xi_2, ..., \xi_k) := \sum_{i=1}^{k} \alpha_i^2.$$

Trong đó ký hiệu α_i là góc giữa tia $\zeta\xi_i$ và tia $\zeta\xi_{i+1}$ theo hướng ngược chiều kim đồng hồ với chu kỳ $\xi_{k+1} := \xi_i$. Hơn nữa chúng ta cần tính góc nhỏ nhất và góc lớn nhất

$$\underline{\alpha}(\xi_1, ..., \xi_k) = min\{\alpha_1, ..., \alpha_k\}, \ \overline{\alpha}(\xi_1, ..., \xi_k) = max\{\alpha_1, ..., \alpha_k\}.$$

Vì $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 2\pi$ nên biểu thức $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i^2$ có thể đạt được giá trị cực tiểu duy nhất khi $\alpha_1 = ... = \alpha_k = 2\pi/k$ tức là, các tia $\zeta\xi_i$ sẽ cách đều nhau nếu $\xi_1, ..., \xi_k$ được chọn tự do trong R^2. Tuy nhiên, các điểm này bị phụ thuộc vào sự phân bố của các điểm trong tập Ξ và vì vậy, khoảng cách $||\xi_i - \zeta||$ nhỏ nhất có thể. Để đạt được mục đích cân bằng giữa μ nhỏ và khoảng cách cũng nhỏ, chúng tôi đưa ra giới hạn là ξ_i phải được bao quanh bởi m điểm gần nhất với ζ và thuật toán dừng nếu tập $\{\zeta, \xi_1, ..., \xi_k\}$ thỏa mãn

$$\overline{\alpha}(\xi_1, ..., \xi_k) \leq v\underline{\alpha}(\xi_1, ..., \xi_k).$$

Trong đó $m > k$ và $v > 1.0$ là các tham biến được xác định theo kinh nghiệm.

Ý tưởng thuật toán

Với mỗi $\zeta \in \Xi_{int}$, chọn tập các tâm địa phương ξ_i với $i = 1, ..., k$ sao cho thỏa mãn điều kiện thứ nhất là các tia liền kề $\zeta\xi_i$ và $\zeta\xi_{i+1}$ tạo thành các góc đều nhất có thể và điều kiện thứ hai là các tâm ξ_i với $i = 1, ..., k$ gần tâm ζ nhất có thể.

Nội dung thuật toán

Input: Ξ, ζ.

Output: Ξ_ζ.

Các tham biến: k là số các điểm ξ_i cần thiết trong tập Ξ_ζ, $m > k$(số các tâm nằm trong lân cận của ζ) và $v > 1$ (giới hạn góc đều mà có thể chấp nhận được).

I. Tìm m điểm $\xi_1, ..., \xi_m$ gần ζ nhất với điều kiện $\xi_1, ..., \xi_m$ thuộc $\Xi \backslash \{\zeta\}$, sắp xếp các điểm $\xi_1, ..., \xi_m$ theo chiều tăng dần theo khoảng cách đến ζ tập Ξ_ζ ban đầu chứa ζ và k điểm đầu tiên, $\Xi_\zeta := \{\zeta, \xi_1, ..., \xi_k\}$. Nếu $\overline{\alpha}(\xi_1, ..., \xi_k) \leq v\underline{\alpha}(\xi_1, ..., \xi_k)$ thì STOP: trả về Ξ_ζ.

II. *For* $i = k+1, ..., m$

1. Tính các góc $\alpha'_1, ..., \alpha'_{k+1}$ được tạo thành bởi tập mở rộng

$$\{\xi'_1, ..., \xi'_{k+1}\} = \{\xi_1, ..., \xi_k, \xi_i\}.$$

2. Nếu góc giữa $\zeta\xi_i$ và góc giữa hai tia lân cận của nó đều lớn hơn góc nhỏ nhất $\underline{\alpha}' := \underline{\alpha}(\xi_1, ..., \xi_k, \xi_i)$ thì:

i. Tìm j sao cho $\alpha'_j = \underline{\alpha}'$. Chọn $p = j$ hoặc $p = j+1$ phụ thuộc vào $\alpha'_{j-1} < \alpha'_{j+1}$ hoặc $\alpha'_{j-1} \geq \alpha'_{j+1}$.

ii. Nếu $\mu(\{\xi'_1,...,\xi'_{k+1}\} \setminus \{\xi'_p\}) < \mu(\xi_1,...,\xi_k)$ thì:

a. Cập nhật $\{\xi_1,...,\xi_k\} = \{\xi'_1,...,\xi'_{k+1}\} \setminus \{\xi'_p\}$.

b. Nếu $\overline{\alpha}(\xi_1,...,\xi_k) \leq v\underline{\alpha}(\xi_1,...,\xi_k)$ thì STOP: trả về tập hiện hành $\Xi_\zeta = \{\zeta,\xi_1,...,\xi_k\}$.

III. Chú ý rằng trong trường hợp thuật toán không kết thúc sớm và $\overline{\alpha}(\xi_1,...,\xi_k) > v\underline{\alpha}(\xi_1,...,\xi_k)$ thỏa mãn tập hiện hành $\Xi_\zeta = \{\zeta,\xi_1,...,\xi_k\}$. Tìm j sao cho $\alpha_j = \underline{\alpha}(\xi_1,...,\xi_k)$. Chọn $p = j$ hoặc $p = j+1$ phụ thuộc vào $\alpha_{j-1} < \alpha_{j+1}$ hoặc $\alpha_{j-1} \geq \alpha_{j+1}$. STOP: trả về $\{\xi_1,...,\xi_{k+1}\} \setminus \{\xi_p\}$

Nhận xét:

1. Nếu thuật toán kết thúc bởi Bước III thì Ξ_ζ chứa $k+1$ điểm (bao gồm cả ζ).

2. m điểm gần nhất trong Bước I có thể được tìm thấy hiệu quả theo hướng không lưới bằng cách sử dụng cấu trúc dữ liệu chuẩn space-partitioning như kd-tree.

3. Dễ dàng thấy rằng việc chọn p trong bước II(2) i đảm bảo rằng
$\mu\{\xi'_1,...,\xi'_{k+1}\} \setminus \{\xi'_p\} = min\left\{\mu(\{\xi'_1,...,\xi'_{k+1}\} \setminus \left\{\xi'_j\right\}), \{\xi'_1,...,\xi'_{k+1}\} \setminus \left\{\xi'_{j+1}\right\}\right\}$.
Một quan sát giống như áp dụng chọn p trong Bước III.

4. Trong trường hợp các miền phức tạp, nếu phần giữa của ζ và ξ_i cắt miền biên thì nên bỏ các điểm ξ_i này đi ngay trong Bước I.

Đánh giá độ phức tạp của thuật toán

Mệnh đề 2.2.1. *Cho N là các tâm rời rạc Ξ, N_{int}, là số các tâm thuộc tập Ξ_{int}, k là số tâm trong bộ tâm cho hệ số nội suy RBF Ξ_ζ và $m(m > k)$ là* *số tâm gần ζ nhất. Khi đó độ phức tạp tính toán của thuật toán chọn tâm là $O(N_{int}.m.log(N))$.*

Chứng minh:

Đối với mỗi $\zeta \in \Xi_{int}$,

I. Tính chi phí tính toán đối với bước I

1. Thời gian tìm m điểm $\xi_1,...,\xi_m$ gần ζ nhất là $O(m.log(N))$.
2. Thời gian sắp xếp m điểm ξ_i, $i = 1,...,m$ theo chiều tăng dần của khoảng cách từ ξ_i đến ζ là $O(m^2)$.
3. Thời gian xác định k điểm đầu tiên là $O(k)$.

II. Chi phí tính toán để loại bỏ điểm "xấu" và kết nạp điểm "tốt" trong $m-k$ tâm còn lại, theo nghĩa các tia liền kề $\zeta\xi_i$ và $\zeta\xi_{i+1}$ tạo thành các góc đều nhất như có thể và đồng thời các tâm ξ_i với $i = 1,...,k-1$ gần tâm ζ nhất có thể.

1. Chi phí tính toán đối với bước II.1 là $O(k+1)$.
2. Chi phí tính toán đối với bước II.2.i là $O(k+1)^2$.
3. Chi phí tính toán đối với bước II.2.ii là $O(1)$.
   Vì vậy chi phí tính toán đối với bước II. là $O((m-k).log((k+1)^2))$.

III. Chi phí tính toán cần thiết khi thuật toán không kết thúc sớm là $O(k^2)$.
Vì vậy, độ phức tạp thuật toán của đoạn chương trình từ bước I đến bước III là theo quy tắc cộng. Nên nó chính là độ phức tạp của bước I và nó là $O(m.log(N))$. Hơn nữa, N_{int} là số nút trong tập Ξ_{int} nên độ phức tạp của thuật toán chọn tâm là $O(N_{int}.m.log(N))$. Vì vậy mệnh đề 2.2.1 được chứng minh [2].

2.3. Tham số hình dạng của hàm RBF

Trong khuôn khổ luận văn này, chúng tôi không đề cập đến việc chọn tham số hình dạng tối ưu với chi phí tính toán không đáng kể mà chỉ đề cập đến chọn tham số hình dạng đảm bảo cho số điều kiện của ma trận nội suy chấp nhận được.

Ta đã biết rằng chất lượng của các hàm nội suy RBF phụ thuộc nhiều vào các tham số hình dạng $\delta > 0$ trong $\phi(r) = \phi_g(r/\delta), \phi_{imq}(r/\delta)$. Hơn nữa, Các tác giả G. F. Fasshauer, B.Fornberg đã chứng minh rằng số điều kiện của ma trận nội suy tỉ lệ thuận với tham số hình dạng.

Vì vậy, các thử nghiệm để khảo sát trong luận văn này sẽ chọn giá trị tham số hình dạng có giá trị lớn nhất trước khi ma trận nội suy của hệ phương trình (2.1.8) vượt quá 10^{12} và chúng tôi gọi là tham số 'safe' hay tham số an toàn. Trong trường hợp này, chúng tôi sử dụng phương pháp tìm kiếm nhị phân

2.4. Xấp xỉ đạo hàm nhờ véc tơ trọng số bởi nội suy hàm RBF

Với mỗi $\zeta \in \Xi_{int}$:

1. Chọn bộ tâm hỗ trợ tính xấp xỉ đạo hàm $\Xi_\zeta := \{\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_{k+1}\}$ với $\xi_1 := \zeta$, theo một tiêu chuẩn nào đó. Chẳng hạn 1 tiêu chuẩn trong Mục 2.2.

2. Tính ma trận nội suy $\Phi|_{\Xi_\zeta}$

$$\Phi|_{\Xi_\zeta} = \begin{pmatrix} \Phi(0) & \ldots & \Phi(\xi_1 - \xi_{k+1}) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \Phi(\xi_{k+1} - \xi_1) & \ldots & \Phi(0) \end{pmatrix}. \tag{2.4.1}$$

3. Tính giá trị tham số hình dạng 'safe' lớn nhất trước số điều kiện của ma trận nội suy (2.4.1) vượt qua 10^{12}.

4. Sử dụng giá trị tham số hình dạng 'safe' vừa tính tại bước 3 để tính véc tơ trọng số theo công thức (2.1.7) là

$$w = [\Phi|_{\Xi_\zeta}]^{-1} D\Phi(\zeta - .)|_{\Xi_\zeta}. \tag{2.4.2}$$

5. Tính xấp xỉ đạo hàm theo công thức (2.1.7) như sau

$$Ds(\zeta) = \sum_{i=1}^{k+1} w_i(\zeta) u(\xi_i). \tag{2.4.3}$$

2.5. Kết luận

Trong chương này chúng tôi tập trung chủ yếu vào trình bày cách tính véc tơ trọng số nhờ nội suy hàm RBF, sau đó miêu tả lại một số cách tìm bộ tâm hỗ trợ tính xấp xỉ đạo hàm, tiếp theo là cách tính tham số hình dạng 'safe' dùng trong luận văn này và cuối cùng là cách tính xấp xỉ đạo hàm nhờ véc tơ trọng số bởi nội suy hàm cơ sở bán kính.

Từ những kiến thức trình bày trong chương này, ta có thể nhận thấy rằng: Phương pháp tính xấp xỉ đạo hàm dựa trên nội suy RBF thích hợp trên miền hình học phức tạp, không gian nhiều chiều, phân bố dữ liệu phân tán vì hàm RBF là hàm khoảng cách khi đó trong không gian nhiều chiều thay vì phải làm việc với hàm nhiều biến, ta chỉ cần làm việc với hàm một biến. Tuy nhiên, chi phí bởi phương pháp này cao vì với mỗi điểm ζ ta cần phải đi tìm bộ tâm Ξ_ζ và cần tính véc tơ trọng số w bởi công thức (2.4.2). Hiện nay đã có nhiều cách tiếp cận để khắc phục những nhược điểm của phương pháp này.

Trong chương tiếp theo chúng tôi tiến hành thử nghiệm để chứng tỏ rằng nếu sử dụng phương pháp nội suy RBF mà dùng bộ tâm Ξ_ζ không theo cách chọn của thuật toán trong [3] với số tâm xung quanh ζ là 6 thì có thể cho kết quả không tốt. Chúng tôi tiến hành bằng cách dùng ngay bộ tâm Ξ_ζ theo cách chọn của thuật toán chọn tâm trong [3] với giá trị $k = 5, 6, 7, 8, 9$, tiếp theo chúng tôi thử nghiệm với bộ tâm Ξ_ζ theo tiêu chuẩn *láng giềng gần nhất* và *n điểm tự nhiên* với $n = 5, 6, 7, 8, 9$.

Chương 3

Thử nghiệm số

Độ chính xác của nội suy RBF phụ thuộc rất nhiều vào bộ tâm được chọn để tính véc tơ trọng số. Vì vậy trong chương này, chúng tôi tập trung vào khảo sát sự ảnh hưởng của bộ tâm được chọn để tính véc tơ trọng số cho tính xấp xỉ đạo hàm nhờ nội suy RBF. Cụ thể hơn, chúng tôi khảo sát tham số k (số tâm được chọn) trong các tiêu chuẩn chọn tâm, các tiêu chuẩn này đã được trình bày trong chương 2. Mục đích của việc khảo sát này nhằm tìm ra (quy luật) số tâm được chọn để tính véc tơ trọng số cho tính xấp xỉ đạo hàm nhờ nội suy RBF thường bao nhiêu thì là tốt.

Phương pháp nội suy RBF trên dữ liệu phân bố phân tán (Dữ liệu do khảo sát, đo đạc hoặc là kết quả của một thử nghiệm nào đó ...). Trong khuôn khổ luận văn này, chúng tôi sử dụng dữ liệu có sẵn và được tải từ file dữ liệu và chỉ thử nghiệm trên hàm RBF Gausian.

- Đối với các hàm ít dao động và dữ liệu phân bố tương đối đều, chúng tôi sẽ thử với k điểm gần nhất, $k = 5, 6, \ldots, 12$.

- Đối với các hàm có đo dao động mạnh và dữ liệu phân bố thành cụm, chúng tôi sẽ thử với $k = 5, 6, \ldots, 12$.

3.1. Thử nghiệm

3.1.1. Rời rạc hóa bài toán

Cho D là toán tử đạo hàm, u là hàm cho trước, cần tìm $f : \Omega \to \mathbb{R}$ thỏa mãn

$$\begin{aligned} Du &= f \quad on \quad \Omega, \\ u &= g \quad on \quad \partial\Omega. \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

Bài toán (3.1.1) được rời rạc trong dạng hệ phương trình tuyến tính đối với véc tơ $\hat{u}_= [\hat{u}_\xi]_{\xi \in \Xi}$ như sau:

$$\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta,\xi} \hat{u}_\xi = f(\zeta), \quad \zeta \in \Xi_{\text{int}}; \qquad u_\xi = g(\xi), \quad \xi \in \partial\Xi, \tag{3.1.2}$$

trong đó

1. $\Xi \subset \overline{\Omega}$ là các tâm rời rạc.
2. $\partial\Xi := \Xi \cap \partial$ là các tâm rời rạc trên biên.
3. $\Xi_{\text{int}} := \Xi \backslash \partial\Xi$ là tập các tâm nằm trong miền.
4. Ξ_ζ là tập hợp các tâm gồm ζ và một số điểm lân cận được lựa chọn $\xi \in \Xi$.
5. $\mathrm{w}_{\zeta,\xi} \in \mathbb{R}$ là các véctơ trọng số được chọn sao cho $\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta,\xi} u_\xi$ là xấp xỉ của $Du(\zeta)$.

3.1.2. Các hàm thử và miền Ω tương ứng

Chúng tôi xét các hàm thử sau:

1. $u_1 = e^{-x^2-y^2}$.
2. $u_2 = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$.
3. $u_3 = log(x^2 + y^2)$.

cùng với đạo hàm bậc nhất và đạo hàm bậc hai của nó như là vế phải của hệ phương trình(3.1.2) được tính bởi các công thức:

1. Đạo hàm bậc nhất

$$Du := \frac{\partial u}{\partial x}(x,y) + \frac{\partial u}{\partial y}(x,y).$$

2. Đạo hàm bậc hai

$$D^2u := \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,y) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x,y) + 2\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}(x,y).$$

3. Toán tử Laplace

$$\Delta u := \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,y) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x,y).$$

Miền xác định của các hàm u_1, u_2, u_3 được minh họa tương ứng trong hình 3.1 là

a. Các hàm u_1 và u_2 được xác định trong miền Ω hình vuông $(-1,1)^2$.

b. Hàm u_3 được xác định trong miền Ω hình vuông $(0.01, 1.01)^2$.

Lược đồ giải bài toán (3.1.2) như sau:

1. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{int}$

   a. Chọn bộ tâm Ξ_ζ.

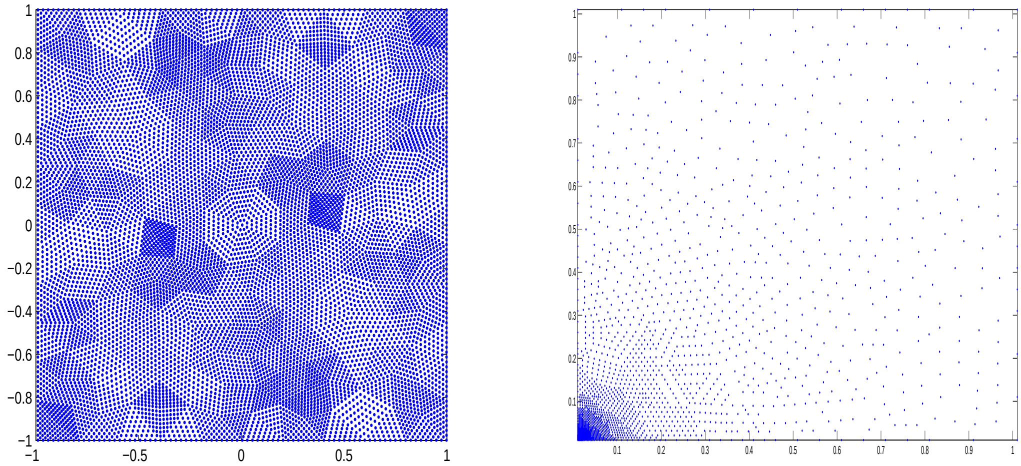
   b. Tính véctơ trọng số $\mathrm{w}_{\zeta,\xi}$ bởi công thức

$$w = [\Phi|_{\Xi_\zeta}]^{-1} D\Phi(\zeta - .)|_{\Xi_\zeta}.$$

2. Sử dụng các véctơ trọng số $\mathrm{w}_{\zeta,\xi}$ để tính $Ds(\zeta)$.

3. Tính sai số vi phân *rms* bởi công thức

$$\mathrm{rmsed} := \left(\frac{1}{\#\Xi_{\mathrm{int}}} \sum_{\zeta \in \Xi_{\mathrm{int}}} r_\zeta^2 \right)^{1/2}, \quad r_\zeta = f(\zeta) - \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta,\xi} u(\xi).$$



(a) Ω là hình vuông $(-1,1)^2$ tương ứng với hàm u_1 và u_2 với 11369 điểm

(b) Ω là hình vuông $(0.01,1.01)^2$ tương ứng với hàm u_3 với 1940 điểm

Hình 3.1: Sự phân bố tâm

3.1.3. Mục đích của thử nghiệm

Mục đích của thử nghiệm để chứng tỏ rằng mỗi phương pháp đều có cách chọn bộ tâm Ξ_ζ theo cách riêng của nó để đảm bảo độ chính xác cao nhất. Hơn nữa, nếu dùng phương pháp nội suy RBF thì ta có thể yên tâm sử dụng thuật toán chọn tâm trong [3] với tham số $k=6$.

3.2. Tính xấp xỉ đạo hàm cấp 1

Trong thử nghiệm, chúng tôi sử dụng hàm Gauss và dùng các hàm trong phần 3.1.2 với các miền tương ứng. Bảng các hàm sử dụng trong thử nghiệm:

Các kết quả thử nghiệm của các hàm với sai số *rms* được minh họa qua các bảng sau:

	Vế phải của phương trình (3.1.2)	Nghiệm chính xác
	$f(x,y) := u'(x,y)$ $= \frac{\partial u}{\partial x}(x,y) + \frac{\partial u}{\partial y}(x,y)$	$u(x,y)$
u_1	$-2(x+y)\,u(x,y)$	$e^{-x^2-y^2}$
u_2	$\pi \sin \pi (x+y)$	$\sin(\pi x)\sin(\pi y)$
u_3	$\frac{2(x+y)}{x^2+y^2}$	$\log(x^2+y^2)$

Bảng 3.1: Các hàm sử dụng trong thử nghiệm tính xấp xỉ đạo hàm cấp 1

Sử dụng thuật toán chọn trong [3]								
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$	$k=12$
155	1.9e-002	1.3e-002	1.1e-002	9.0e-003	6.1e-003	4.8e-003	2.4e-003	2.2e-003
659	3.4e-003	3.3e-003	2.7e-003	1.9e-003	1.1e-003	5.0e-004	2.2e-004	2.4e-004
2717	8.4e-004	7.4e-004	6.0e-004	3.9e-004	1.7e-004	1.2e-004	2.8e-005	2.5e-005
11033	2.1e-004	1.1e-004	7.9e-005	6.4e-004	4.7e-004	4.3e-004	6.4e-005	1.2e-004
Chọn n điểm gần nhất								
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$	$k=12$
155	1.3e-002	1.2e-002	1.1e-002	7.4e-003	5.0e-003	1.7e-003	1.3e-003	1.1e-003
659	3.4e-003	3.3e-003	2.6e-003	1.8e-003	8.1e-004	4.3e-004	2.0e-004	8.8e-005
2717	8.4e-004	7.4e-004	5.9e-004	3.6e-004	1.9e-004	1.6e-004	1.3e-004	3.2e-004
11033	2.1e-004	1.1e-004	7.8e-005	6.4e-004	5.2e-004	5.0e-004	4.4e-004	1.1e-003

Bảng 3.2: Sai số *rms* của xấp xỉ đạo hàm cấp 1 đối với hàm u_1.

3.3. Tính xấp xỉ đạo hàm cấp 2

Các hàm trong phần 3.1.2 với các miền tương ứng được sử dụng trong thử nghiệm tính xấp xỉ đạo hàm cấp 2 như sau:

Sử dụng thuật toán chọn trong [3]								
#	$k = 5$	$k = 6$	$k = 7$	$k = 8$	$k = 9$	$k = 10$	$k = 11$	$k = 12$
155	1.4e-001	1.4e-001	1.2e-001	1.2e-001	1.1e-001	7.4e-002	7.3e-002	6.4e-002
659	3.6e-002	3.5e-002	2.9e-002	2.5e-002	1.9e-002	1.2e-002	4.8e-003	5.6e-003
2717	9.1e-003	8.5e-003	7.3e-003	5.2e-003	3.0e-003	1.8e-003	3.7e-004	2.7e-004
11033	2.3e-003	1.9e-003	1.6e-003	1.4e-003	9.6e-004	9.1e-004	1.8e-004	3.4e-004
Chọn n điểm gần nhất								
#	$k = 5$	$k = 6$	$k = 7$	$k = 8$	$k = 9$	$k = 10$	$k = 11$	$k = 12$
155	1.8e-001	1.3e-001	1.1e-001	1.0e-001	1.1e-001	4.5e-002	2.4e-002	1.9e-002
659	4.0e-002	34e-002	2.8e-002	2.1e-002	1.7e-002	1.1e-002	7.2e-003	2.0e-003
2717	9.5e-003	8.4e-003	7.1e-003	4.8e-003	2.6e-003	1.7e-003	9.2e-004	5.3e-004
11033	2.3e-003	1.8e-003	1.5e-003	1.4e-003	1.1e-003	1.1e-003	1.0e-003	3.1e-003

Bảng 3.3: Sai số *rms* của xấp xỉ đạo hàm cấp 1 đối với hàm u_2.

Sử dụng thuật toán chọn trong [3]						
#	$k = 5$	$k = 6$	$k = 7$	$k = 8$	$k = 9$	$k = 10$
140	5.50e-001	1.75e-001	4.74e-001	6.40e-001	1.45e+000	1.67e+000
162	4.78e-001	4.48e-001	6.85e-001	2.97e+000	1.13e+000	1.97e+000
220	3.82e-001	3.28e-001	3.62e-001	6.17e-001	8.06e-001	3.67e-001
466	1.72e-001	1.19e-001	1.00e-001	1.77e-001	1.39e-001	9.55e-002
678	1.40e-001	7.98e-002	8.18e-002	1.60e-001	9.99e-002	8.05e-002
1220	5.82e-002	4.65e-002	4.48e-002	1.13e-001	5.35e-002	4.22e-002
1811	6.91e-002	3.50e-002	3.54e-002	1.25e-001	4.65e-002	3.31e-002
3110	6.14e-002	2.24e-002	2.45e-002	1.18e-001	5.26e-002	3.46e-002
4769	4.03e-002	1.93e-002	2.21e-002	1.26e-001	4.41e-002	3.56e-002
Chọn n điểm gần nhất						
#	$k = 5$	$k = 6$	$k = 7$	$k = 8$	$k = 9$	$k = 10$
140	6.68e-001	2.64e-001	3.51e-001	6.63e-001	2.25e+000	5.42e-001
162	6.82e-001	4.88e-001	5.19e-001	2.88e+000	2.18e+000	7.31e-001
220	1.07e+000	3.56e-001	2.44e-001	3.50e-001	2.98e-001	2.23e-001
466	4.74e-001	1.37e-001	8.52e-002	1.06e-001	7.28e-002	5.86e-002
678	1.38e-001	8.48e-002	7.32e-002	1.31e-001	7.32e-002	3.92e-002
1220	1.30e-001	4.98e-002	3.98e-002	8.96e-00	5.56e-002	4.84e-002
1811	4.92e-002	3.60e-002	3.35e-002	1.18e-001	4.54e-002	3.47e-002
3110	2.94e-002	2.38e-002	2.40e-002	1.11e-001	5.60e-002	3.28e-002
4769	2.01e-002	1.99e-002	2.11e-002	1.21e-001	4.53e-002	4.19e-002

Bảng 3.4: Sai số *rms* của xấp xỉ đạo hàm cấp 1 đối với hàm u_3.

	Vế phải của phương trình (3.1.2)	Nghiệm chính xác
	$f(x,y) := u''(x,y)$ $= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,y) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x,y) + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}(x,y)$	$u(x,y)$
u_1	$4u(x,y)\left((x+y)^2-1\right)$	$e^{-x^2-y^2}$
u_2	$2\pi^2 \cos\pi(x+y)$	$\sin(\pi x)\sin(\pi y)$
u_3	$-\frac{8xy}{(x^2+y^2)^2}$	$\log(x^2+y^2)$

Bảng 3.5: Các hàm sử dụng trong thử nghiệm tính xấp xỉ đạo hàm cấp 2

Sử dụng thuật toán chọn trong [3]								
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$	$k=12$
155	7.1e-002	5.5e-002	5.1e-002	5.8e-002	4.5e-002	4.0e-002	4.3e-002	3.5e-002
659	3.8e-002	2.3e-002	2.0e-002	1.5e-002	1.0e-002	7.3e-003	5.7e-003	6.0e-003
2717	1.9e-002	7.9e-003	6.5e-003	5.5e-003	2.1e-003	1.6e-003	1.6e-003	1.6e-003
11033	9.3e-003	1.9e-003	1.3e-003	3.2e-003	5.5e-003	5.0e-003	2.8e-003	2.8e-003
Chọn n điểm gần nhất								
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$	$k=12$
155	1.0e-001	5.7e-002	4.9e-002	4.2e-002	3.3e-002	2.4e-002	2.1e-002	1.7e-002
659	4.1e-002	2.3e-002	1.7e-002	1.1e-002	7.5e-003	4.4e-003	3.4e-003	2.6e-003
2717	1.9e-002	7.9e-003	5.1e-003	2.9e-003	1.5e-003	1.3e-003	1.3e-003	2.1e-003
11033	9.3e-003	2.0e-003	1.1e-003	3.0e-003	2.8e-003	2.6e-003	2.8e-003	5.2e-003

Bảng 3.6: Sai số *rms* của xấp xỉ đạo hàm cấp 2 đối với hàm u_1.

3.4. Áp dụng giải phương trình Poisson với điều kiện biên Dirichlet

Trong phần này chúng tôi áp dụng cách tính véc tơ trọng số để tính đạo hàm ở các phần trước vào giải phương trình Poisson với điều kiện biên Dirichlet. Các hàm trong phần 3.1.2 với các miền tương ứng được sử dụng trong thử nghiệm giải phương trình Poisson với điều kiện biên Dirichlet như

Lược đồ giải bài toán (3.1.2) như sau:

1. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{int}$

   a. Chọn bộ tâm Ξ_ζ.

Sử dụng thuật toán chọn trong [3]								
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$	$k=12$
659	7.3e-001	3.3e-001	2.5e-001	2.5e-001	2.4e-001	1.7e-001	1.5e-001	1.6e-001
2717	3.7e-001	1.2e-001	9.0e-002	7.6e-002	5.0e-002	2.9e-002	2.0e-002	1.8e-002
11033	1.9e-001	4.0e-002	2.7e-002	2.0e-002	2.1e-002	1.7e-002	1.7e-002	1.8e-002
Chọn n điểm gần nhất								
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$	$k=12$
659	7.5e-001	3.7e-001	2.5e-001	2.0e-001	1.6e-001	1.2e-001	9.7e-002	7.1e-002
2717	3.8e-001	1.3e-001	7.6e-002	5.0e-002	2.8e-002	1.6e-002	1.3e-002	1.1e-002
11033	1.9e-001	4.1e-002	2.1e-002	1.4e-002	1.3e-002	1.4e-002	1.4e-002	2.7e-002

Bảng 3.7: Sai số *rms* của xấp xỉ đạo hàm cấp 2 đối với hàm u_2.

	Vế phải của phương trình (3.1.2)	Nghiệm chính xác
	$\Delta u(x,y) := \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,y) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x,y)$	$u(x,y)$
u_1	$4(x^2+y^2-1)e^{-(x^2+y^2)}$	$e^{-x^2-y^2}$
u_2	$-2\pi^2\sin(\pi x)\sin(\pi y)$	$\sin(\pi x)\sin(\pi y)$
u_3	0	$\log(x^2+y^2)$

Bảng 3.8: Các hàm sử dụng trong thử nghiệm tính xấp xỉ giải phương trình Poisson

b. Tính véctơ trọng số $\mathrm{w}_{\zeta,\xi}$ bởi công thức

$$w = [\Phi|_{\Xi_\zeta}]^{-1}\Delta\Phi(\zeta - .)|_{\Xi_\zeta}.$$

2. Sử dụng các véctơ trọng số $\mathrm{w}_{\zeta,\xi}$ để tính $\Delta s(\zeta)$.

3. Tính sai số trung bình bình phương E của nghiệm xấp xỉ $\hat{u}$ với nghiệm chính xác u bởi công thức

$$E = \Big(\frac{1}{N}\sum_{\zeta\in\Xi_{\mathrm{int}}}(\hat{u}_\zeta - u(\zeta))^2\Big)^{1/2}. \quad (3.4.1)$$

trong đó $N = \#\Xi_{\mathrm{int}}$ là số các điểm trong.

Các kết quả thử nghiệm của các hàm với sai số trung bình bình phương E được minh họa qua các bảng sau:

Sử dụng thuật toán chọn trong [3]							
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$
155	3.18e-003	3.12e-003	3.87e-003	3.73e-003	4.03e-003	2.76e-003	2.69e-003
659	7.90e-004	7.44e-004	9.57e-004	5.42e-004	9.58e-004	4.62e-004	2.51e-004
2717	1.91e-004	1.51e-004	1.18e-004	7.45e-005	4.40e-005	1.84e-004	1.74e-004
Chọn n điểm gần nhất							
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$
155	3.07e-003	2.43e-003	3.61e-003	3.58e-003	3.27e-003	2.13e-003	1.51e-003
659	5.32e-004	6.66e-004	7.89e-004	7.82e-004	5.93e-004	2.64e-004	1.41e-004
2717	8.61e-005	1.46e-004	1.41e-004	6.38e-005	3.77e-005	1.74e-004	1.50e-004

Bảng 3.9: Sai số trung bình bình phương E đối với hàm u_1.

Sử dụng thuật toán chọn trong [3]							
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$
155	3.86e-002	1.57e-002	1.90e-002	2.04e-002	2.03e-002	2.13e-002	2.17e-002
659	4.50e-003	3.69e-003	4.65e-003	5.94e-003	7.93e-003	4.06e-003	2.60e-003
2717	1.55e-003	8.72e-004	1.18e-003	1.27e-003	1.04e-003	4.80e-004	2.78e-004
Chọn n điểm gần nhất							
#	$k=5$	$k=6$	$k=7$	$k=8$	$k=9$	$k=10$	$k=11$
155	2.82e-002	1.55e-002	1.90e-002	1.96e-002	2.01e-002	1.27e-002	9.70e-003
659	7.64e-003	3.72e-003	4.43e-003	4.75e-003	4.62e-003	2.81e-003	1.70e-003
2717	3.16e-003	8.77e-004	1.05e-003	9.52e-004	7.20e-004	3.39e-004	1.82e-004

Bảng 3.10: Sai số trung bình bình phương E đối với hàm u_2.

Sử dụng thuật toán chọn trong [3]							
#	$k = 5$	$k = 6$	$k = 7$	$k = 8$	$k = 9$	$k = 10$	$k = 11$
162	5.48e-003	2.71e-003	5.60e-003	6.01e-003	1.07e-002	3.32e-001	2.92e-002
220	5.77e-003	3.09e-003	1.78e-003	1.92e-003	2.05e-002	2.16e-002	3.05e-003
466	1.25e-003	9.66e-004	3.42e-004	4.56e-004	5.19e-003	1.24e-003	1.55e-003
678	1.15e-003	5.84e-004	4.95e-004	4.40e-004	4.88e-004	5.53e-004	5.40e-004
1220	9.25e-004	2.66e-004	9.35e-005	1.43e-004	4.86e-004	2.29e-004	7.22e-004
1811	5.22e-004	2.22e-004	8.16e-005	2.40e-004	2.94e-004	4.76e-004	4.34e-004
3110	2.59e-004	1.16e-004	5.69e-005	1.94e-004	1.10e-004	1.46e-004	1.49e-004
4769	1.72e-004	6.76e-005	3.59e-005	1.90e-004	6.96e-004	1.32e-004	1.58e-003
Chọn n điểm gần nhất							
#	$k = 5$	$k = 6$	$k = 7$	$k = 8$	$k = 9$	$k = 10$	$k = 11$
162	2.78e-002	2.36e-002	1.30e-001	2.19e-001	2.41e-001	4.39e-001	1.63e-001
220	1.69e-002	1.19e-002	6.25e-003	3.51e-003	1.98e-003	2.39e-003	2.98e-003
466	1.15e-002	6.26e-003	4.20e-004	4.36e-004	6.98e-004	7.17e-004	5.53e-004
678	1.88e-002	2.12e-003	6.42e-004	6.37e-004	1.40e-003	1.45e-004	3.27e-004
1220	3.22e-002	8.01e-004	4.52e-004	2.78e-004	2.91e-004	2.47e-004	2.89e-004
1811	4.34e-003	1.36e-003	1.52e-004	1.32e-004	2.73e-004	1.54e-004	1.92e-004
3110	7.38e-003	2.46e-004	8.21e-005	1.57e-004	8.19e-005	1.75e-004	1.75e-004
4769	1.02e-002	4.90e-004	1.51e-004	1.13e-004	1.62e-004	2.64e-004	3.17e-004

Bảng 3.11: Sai số trung bình bình phương E đối với hàm u_3.

3.5. Kết luận

Kết quả thử nghiệm cho thấy rằng:

- Thuật toán chọn tâm là đặc biệt quan trọng đối với nội suy dữ liệu phân tán trong trường hợp hàm có độ dao động lớn.
- Độ chính xác của nghiệm xấp xỉ phụ thuộc rất nhiều vào số lượng tâm được chọn để nội suy.
- Với hàm có độ dao động ít hay dữ liệu phân bố tương đối đều thì ta chỉ cần chọn các tâm gần với vị trí cần nội suy nhất và có thể lấy các tâm nằm trên hai vành khuyên đầu tiên với vị trí tâm vành khuyên gần với ζ.
- Khi sử dụng thuật toán chọn tâm được trình bày trong luận văn này và các thí dụ là bài toán khó thì số tâm được chọn là 6, thường xuyên cho kết quả tốt nhất.

KẾT LUẬN

Trong quá trình tìm hiểu và nghiên cứu đề tài: "Nghiên cứu sự ảnh hưởng của bộ tâm nội suy đến độ chính xác của xấp xỉ đạo hàm dựa trên nội suy hàm cơ sở bán kính", chúng tôi đã thu được những kết quả sau:

- Tìm hiểu những kiến thức cơ sở xung quanh luận văn, từ đó hoàn thiện thêm một số kiến thức nền tảng cho tính toán khoa học.
- Tìm hiểu cách tính đạo hàm dựa trên nội suy hàm RBF.
- Tìm hiểu một vài tiêu chuẩn chọn bộ tâm nội suy.
- Cài đặt chương trình thử nghiệm để rút ra một số kết luận.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] Đặng Quang Á, *Giáo trình phương pháp số*, Nhà xuất bản Đại Học Thái Nguyên, 2009.

[2] M. D. Buhmann. *Radial Basis Functions*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2003.

[3] O. Davydov and D. T. Oanh. *Adaptive meshless centres and RBF stencils for Poisson equation*. Journal of Computational Physis, 230:287–304, 2011.

[4] Tạ Văn Đĩnh, *Phương pháp sai phân hữu hạn và phần tử hữu hạn*, Tạ Văn Đĩnh, Nhà xuất bản Khoa học và kỹ thuật, 2002.

[5] G. F. Fasshauer, *Meshfree Approximation Methods with MATLAB*, World Scientific Publishing Co, Inc, River Edge, NJ, USA, 2007.

[6] Đinh Thế Lục, Pham Huy Điển, Tạ Duy Phượng, *Giải tích các hàm nhiều biến*, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia Hà Nội, 2002.

[7] Đặng Thị Oanh, *Phương pháp không lưới giải phương trình Poisson*, Luận án tiến sĩ, 2012.

[8] Nguyễn Đình Trí, Tạ Văn Đĩnh, Nguyễn Hồ Quỳnh, *Toán cao cấp*, Tập 3, Nhà xuất bản Giáo dục, 2006.

[9] H. Wendland. *Scattered Data Approximation*. Cambridge University Press, 2005.

NHẬN XÉT CỦA GIÁO VIÊN HƯỚNG DẪN

....

....

....

....

....

....

....

....

....

....

....

....

....

....

GIÁO VIÊN HƯỚNG DẪN

TS. Đặng Thị Oanh